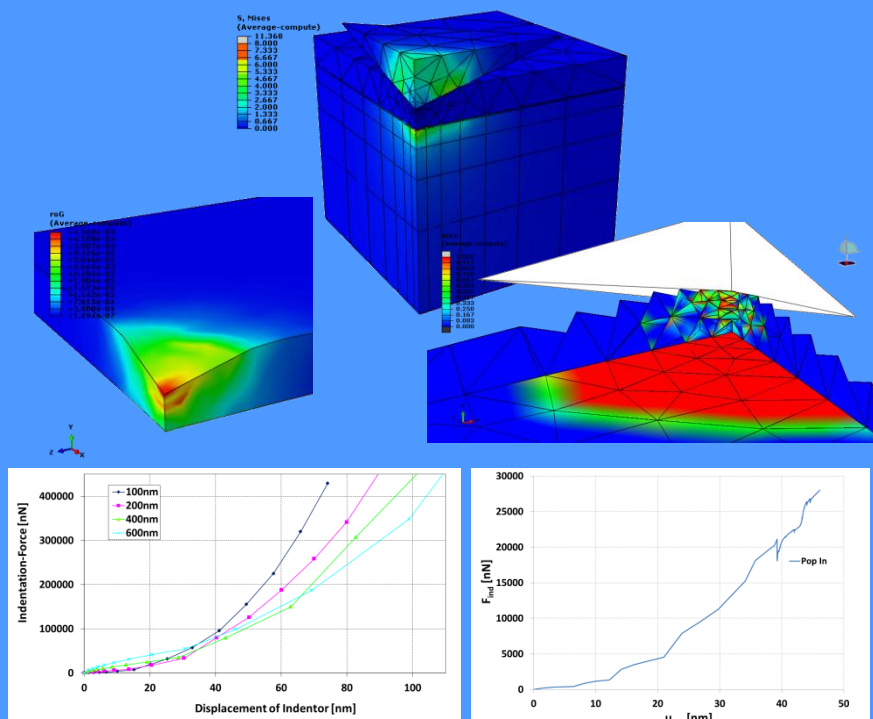




Plastizität und Skaleneffekte sowie Deformations- und Versagensmodellierung dünner metallischer Schichten bei Nanoindentation

Andreas Trondl



Plastizität und Skaleneffekte sowie Deformations- und Versagensmodellierung dünner metallischer Schichten bei Nanoindentation

Am Fachbereich Bauingenieurwesen und Geodäsie
der Technischen Universität Darmstadt
zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs
(Dr.-Ing.)

genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Ing. Andreas Trondl

aus Leoben, Österreich

Erstreferent:	Prof. Dr.-Ing. habil. F. Gruttmann
Korreferent:	Prof. Dr.-Ing. habil. D. Gross
Tag der Einreichung:	02. 07. 2012
Tag der mündlichen Prüfung:	22. 08. 2012

Darmstadt
D17

Trondl, Andreas

Plastizität und Skaleneffekte sowie Deformations- und Versagensmodellierung dünner metallischer Schichten bei Nanoindentation

Forschungsberichte des Instituts für Mechanik der Technischen Universität Darmstadt

Band 26

Herausgeber:

Studienbereich Mechanik
Technische Universität Darmstadt
Hochschulstraße 1
64289 Darmstadt
Germany

© 2012 Andreas Trondl
Elsässer Straße 15n
79110 Freiburg im Breisgau
Germany

Alle Rechte, insbesondere das der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Ohne Genehmigung des Autors ist es nicht gestattet, dieses Werk ganz oder teilweise auf photomechanischen, elektronischen oder sonstigem Weg zu vervielfältigen.

ISBN 978-3-935868-26-6

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Mitarbeiter am Fachgebiet für Festkörpermechanik der Technischen Universität (TU) Darmstadt innerhalb des von der DFG geförderten Projektes zum Thema „Modellierung des Deformations- und Versagensverhaltens dünner heterogener metallischer Schichten auf keramischen Substraten“, die an dieser Stelle auch dankend erwähnt sei.

Mein größter Dank gilt sicherlich meinem sehr geschätzten Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Dietmar Gross für die Ermöglichung und Anregungen zu dieser Arbeit sowie für die stets exzellente persönliche und wissenschaftliche Betreuung. Darüber hinaus danke ich Ihm sehr herzlich für seinen immer währenden und intensiven Einsatz, sein großes Interesse an der Entwicklung meiner Arbeit und die wohlwollende wissenschaftliche Förderung, die zum Gelingen derselben sehr beigetragen haben. Zudem brachte er mir stets vollstes Vertrauen entgegen und gewährte mir größtmögliche Freiräume im Rahmen meiner wissenschaftlichen Tätigkeit, was eine wichtige Grundlage für selbstständiges forschendes Arbeiten darstellt und mir in meiner jetzigen Tätigkeit am Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik hier in Freiburg sehr zu Gute kommt. Auch in schwierigen Phasen meiner Promotion brachte er mir gegenüber immer größte Geduld und Verständnis entgegen, ohne die eine Fertigstellung der hier vorliegenden Arbeit nicht möglich gewesen wäre. In manchen schwierigen Momenten wusste er mich stets mit guten Ratschlägen zu motivieren, wofür ich Ihm überaus dankbar bin. Er war für mich nicht nur im universitären sondern auch im privaten Bereich stets ein verständnisvoller wichtiger Ansprechpartner.

Ebenfalls bedanke ich mich herzlichst bei Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Friedrich Gruttmann für sein Interesse an meiner Arbeit und dass er sich als Referent im Rahmen meiner Promotion zur Verfügung gestellt hat.

Außerdem möchte ich mich für das entgegengebrachte Vertrauen von Herrn Dr.-Ing. Leon Mishnaevsky bedanken, da es seiner Initiative zuzuschreiben ist, dass ein seitens der DFG gefördertes Projekt zustande kam, im Rahmen dessen ich meine hier vorliegende Promotion überhaupt erst umsetzen durfte.

Des Weiteren ist es mir ein großes Anliegen mich bei Frau Angelika Prießnigg zu bedanken, die als Sekretärin am Fachgebiet für Festkörpermechanik mir in administrativen und formalen Angelegenheiten vieles abgenommen und erleichtert hat. Auch in schwierigen Zeiten stand Sie mir immer mit Rat und Tat zur Seite, hatte stets ein offenes Ohr und zeigte Anteilnahme für meine Probleme. Mit Ihrer Erfahrung und positiven Art hat Sie mir in so mancher Situation viel weiterhelfen können.

Selbstverständlich möchte ich mich noch bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Uwe Rüppel für den Vorsitz, sowie bei Prof. Dr.-Ing. Ulvi Arslan und Prof. Dr.-Ing. Jens Schneider als Beisitzer im Rahmen meiner Promotionsprüfung bedanken.

Ebenfalls möchte ich mich noch bei allen meinen ehemaligen Kollegen im Fachgebiet für Festkörpermechanik an der TU Darmstadt bedanken, mit denen ich eine anregende, schöne und angenehme Zeit zusammen verbringen durfte, wobei ich an dieser Stelle ganz besonders Herrn Dr.-Ing. Oliver Goy und Herrn Dr.-Ing. Christian Sator sowie Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Ralf Müller erwähnen möchte. Aber auch gegenüber den anderen hier nicht namentlich genannten Kolleginnen und Kollegen möchte ich meinen ausdrücklichen Dank aussprechen, da Sie alle durch Ihr Auftreten und Ihre Hilfsbereitschaft viel zur positiven Atmosphäre am Institut beigetragen haben, was sicherlich nicht als selbstverständlich angesehen werden kann. Ich werde mich immer sehr gerne an diese schöne und gute Zeit erinnern.

Natürlich sollen meine jetzigen Vorgesetzten Herr Dr. rer. nat. Günter Kleer und Herr Dr.-Ing. Torsten Kraft hier am Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik ebenfalls erwähnt werden, da Sie mir in der Endphase meiner Promotion entsprechende Freiräume gewährt haben, ohne die eine Fertigstellung der vorliegenden Arbeit nicht möglich gewesen wäre und wofür ich mich bei Ihnen auch bedanke.

Nicht vergessen möchte ich Frau Dipl.-Ing. Angelika Becherer, die mir bei der schwierigen Endphase meiner Promotion insbesondere bei der sprachlichen Umgestaltung und Korrektur meiner Arbeit weitergeholfen hat, wofür ich Ihr an dieser Stelle auch danken möchte.

Abschließend möchte ich mich noch bei all jenen gegenwärtigen Kollegen hier am Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg bedanken, die mir durch das Korrekturlesen meiner Arbeit viel weitergeholfen haben und auch die eine oder andere Anregung auf den Weg geben konnten. Ins besonders seien an dieser Stelle Herr Dr.-Ing. habil. Ingo Schmidt, Herr Dipl.-Phys. Georg Falkinger, Herr Dipl.-Ing. Pit Polver, Herr Dipl.-Ing. (FH) Thomas Breinlinger und Herr Dipl.-Math. Tobias Rasp genannt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
1.1	Motivation	1
1.2	Wissenschaftliche Entwicklung und Stand der Forschung	2
1.3	Problemstellung, Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	5
2	Theoretische Grundlagen	9
2.1	Allgemeine Kontinuumsmechanik.....	9
2.1.1	Kinematik.....	10
2.1.2	Kinetik, Spannung und Konstitutivgesetz	14
2.1.3	Transformationen tensorieller Größen	17
2.1.4	Zeitableitungen.....	18
2.1.5	Bilanzgleichungen.....	19
2.2	Grundlagen zur Kristallstruktur von Metallen.....	21
2.2.1	Aufbau und Charakterisierung von Kristallen	21
2.2.2	Defekte in Kristallen	25
2.2.2.1	Versetzungen.....	27
2.3	Konstitutive Beschreibungen zum Materialverhalten fester Körper	46
2.3.1	Lokale Modelle	48
2.3.1.1	Elastizität und Isotropie.....	48
2.3.1.2	Plastizität	50
2.3.1.3	Viskose Eigenschaften	52
2.3.2	Nichtlokale Modellbildung	60
2.3.2.1	Modelle mit höheren Gradienten	63
2.3.2.2	Generalisierte Modelle, mikromorphe Kontinua	66
2.4	Inkrementelle und absolute Formulierung, Deformationstheorie	70
2.5	Riss- und Schädigungsbeschreibung	73
2.5.1	Kohäsivzonenmodell	78
3	Plastizitätsmodelle mit Verzerrungsgradienten	83
3.1	Couple-Stress Theory	86
3.2	Strain Gradient Plasticity.....	89
3.3	Mechanism Based Strain Gradient Plasticity.....	94
4	Numerische Implementierung im Rahmen der Finiten Element Methode	105
4.1	Darstellung und Ansätze lokaler Theorien der Festkörpermechanik.....	105
4.1.1	Schwache Formulierung der Erhaltungsgleichungen	105
4.1.2	Variationsformulierung strukturmechanischer Probleme	109

4.1.3	Linearisierung der schwachen Form, Materialtangente	110
4.1.4	Anmerkungen zur Theorie infinitesimaler Deformationen	112
4.2	Spezielle Aspekte nichtlokaler Theorien	114
4.2.1	Darstellung der schwachen Form und Variationsauswertung	114
4.2.2	Ermittlung der Linearisierung.....	118
4.3	Beschreibung und Darstellung der Elementdiskretisierung.....	120
4.3.1	Ansatzfunktionen und Variablentransformation	121
4.3.2	Elementformulierung kinematischer Größen.....	123
4.3.2.1	Erweiterte Theorie höherer Ordnung.....	123
4.3.2.1.1	Darstellung mittels Formfunktionen	125
4.3.2.2	Standardtheorie.....	126
4.3.2.2.1	Darstellung mittels Formfunktionen	127
4.4	Gesamtformulierung auf Elementebene zur allgemeinen softwaretechnischen Implementierung.....	128
4.4.1	Anteile aus erweiterter Theorie	128
4.4.2	Anteile aus Standardtheorie.....	132
4.4.2.1	Spezielle Behandlung bei erweiterter Abhängigkeit von Termen höherer Ordnung..	134
5	Anwendungen, Ergebnisse und Beispiele.....	137
5.1	Verifikation Plastizitätsmodell.....	137
5.2	Nanoindentation	139
5.3	Ansätze zur Beschreibung der Rissbildung	155
6	Zusammenfassung und Ausblick	161
7	Literaturverzeichnis	165

1 Einleitung

Einige in diesem Kapitel formulierte Unterabschnitte sind bewusst vereinfachend und mit weniger fachspezifischen Termini und Ausdrucksweisen versehen worden. Damit soll einerseits ein leichter Einstieg für nicht auf dem Gebiet der Kontinuumsmechanik ausgebildete Ingenieure ermöglicht, andererseits aber auch die immer wieder gestellte Frage nach Anwendbarkeit vor dem Hintergrund des technisch-ökonomischen Gesichtspunktes deutlicher hervorgehoben werden. Ein weiterer Grund der einfach gehaltenen Einleitung liegt in der Vermittlung der zentralen Inhalte dieser Arbeit an einen Leserkreis, welcher nicht immer die Zeit hat, sich mit sehr fachspezifischen Arbeiten im Detail auseinanderzusetzen, jedoch interessiert an Problemen ist, welche die hier vorliegende Thematik betreffen. Zudem lässt sich die Motivation dieser Arbeit nicht ausschließlich aus der reinen naturwissenschaftlichen Erkenntnis ableiten, sondern erhebt durchaus auch den Anspruch auf technisch-wirtschaftliche Anwendungsrelevanz.

1.1 Motivation

Aufgrund der gewachsenen und verbesserten experimentellen Möglichkeiten in den Materialwissenschaften, wurden zunehmend spezielle Entwicklungen neuer Werkstoffe für ganz bestimmte Anwendungen möglich. Hierdurch können diese Anwendungen bzw. Produkte, entsprechend dem wirtschaftlich technologischen Fortschritts Paradigmas, immer weiter optimiert werden. Anders ausgedrückt ist es gegenwärtig erstmals möglich, Werkstoffe aufgrund neuester wissenschaftlicher Methoden für sehr spezielle Anwendungen zu entwickeln bzw. herzustellen oder aber diese weiter zu optimieren. Hinzu kommt die Tatsache, dass in der jüngeren Vergangenheit der Unterschied zwischen wissenschaftlichen Neu- bzw. Weiterentwicklungen im Bereich der Materialwissenschaften und den für die industrielle Herstellung dieser neuen Materialien notwendigen technologischen Verfahren bzw. Prozessen immer geringer wurde. Aus diesem Grunde sind Unternehmen, welche innovative, sehr speziell entwickelte Materialien in ihren Produkten einsetzen, stark daran interessiert, Modelle für die quantitative Beschreibung des physikalischen Verhaltens dieser Werkstoffe zu besitzen, da aus werkstoffwissenschaftlicher Sicht im Wesentlichen meist nur reduzierte qualitative Vorhersagen möglich sind. Des Weiteren ist festzustellen, dass wegen der immer größer werdenden Rechenleistung von Computern und dem Einsatz spezieller Software die Optimierung sowie Entwicklung neuer Produkte mittels Simulationsmethoden immens an Bedeutung gewonnen haben. Aus diesem Grund gewann in der Vergangenheit der Einsatz von Simulationsmethoden wegen der zusätzlich immer größer werdenden wirtschaftlichen Konkurrenz sowie mit den damit verbundenen kürzeren Produktentwicklungszeiten und den zu reduzierenden Kosten immer mehr an Bedeutung. Für explizite Produktentwicklungen mittels computerunterstützter Simulationsmethoden sind jedoch mathematische Modelle notwendig, welche eine quantitative Beschreibung des Stoffverhaltens innerhalb bestimmter Genauigkeitsschranken sicherstellen. Qualitative materialwissenschaftliche Aussagen sind – wie bereits erwähnt wurde – in diesem Kontext kaum einsetzbar, haben allerdings zur Verifikation der quantitativen Modelle eine überaus wichtige Funktion. Die gegenwärtige Schwierigkeit bei der physikalisch-mathematisch motivierten Stoffmodellierung liegt im komplexen, oft auch sehr heterogenen, mikrostrukturellen Aufbau der Werkstoffe, die aber genau dadurch erst ihre speziellen erwünschten makroskopischen Eigenschaften erhalten und somit zur Optimierung des fertigen Bauteils einen signifikanten Beitrag leisten. In der Vergangenheit war es meist völlig ausreichend, die klassische Theorie der Kontinuumsmechanik für die Stoffmodellierung heranzuziehen, da die Werkstoffe in ihrem inneren Aufbau relativ homogen bzw. mikrostrukturell bei weitem nicht so komplex waren, wie diese es heute sind.

Eine eng in diesem Zusammenhang stehende Entwicklung ist in der strukturellen Miniaturisierung mechanisch belasteter Bauteile gegeben. Mit genau dieser Problematik beschäftigt sich ein Teilgebiet der sogenannten Mikrosystemtechnik. Letztgenannter Teilbereich der Mikrosystemtechnik befasst sich im Wesentlichen mit Konstruktion, Herstellung und Anwendung kleinster mechanischer Bauelemente von wenigen bis mehreren Mikrometern. Man unterscheidet einfache Strukturen (z. B. Gitter, Löcher, Kanäle), Sensoren, Aktoren (z. B. Relais, Schalter, Ventile, Pumpen) und Mikrosysteme (Mikromotoren, Druckköpfe). Zur Herstellung werden Technologien eingesetzt, die auch in der Mikrochip-Fertigung zum Einsatz kommen (z. B. galvanische Verfahren, Ätzverfahren, Lasertechnik), es werden aber auch die Photolithographie, Dünnschicht-, Siebdruck- und andere Techniken genutzt. Es ist offensichtlich, dass auch diese kleinsten Strukturen mechanischen Belastungen während des Betriebs unterworfen sind. Zur Berechnung sowie ingenieurtechnischen Auslegung oder gar Optimierung dieser Bauteile benötigt man aber erweiterte physikalisch-mathematische Modelle die eine Beschreibung der vorliegenden Zustände in ausreichender Genauigkeit ermöglichen, da gebräuchliche Theorien aus der makroskopischen

Welt wie bspw. die klassische Theorie der Kontinuumsmechanik auf diese Kleinststrukturen nicht oder nur sehr eingeschränkt anwendbar sind. Der Grund für die Nichtanwendbarkeit von bewährten Modellen aus der makroskopischen Ebene ist vorwiegend darin gegeben, dass diese meist auf einem rein phänomenologischen Ansatz der zu beschreibenden Stoffe basieren. Bei der letztgenannten elementaren Beschreibung betrachtet man die Stoffe bzw. deren Proben als ein System, an dessen Eingang (input) man den zeitlichen Verlauf einer Größe (bspw. Weg), welche im verallgemeinerten Sinn eine äußere Last repräsentiert, anlegt, und das an seinem Ausgang (output) den Verlauf einer anderen Größe (bspw. Kraft) ausgibt, die wiederum eine Reaktion in Form der inneren Spannungen darstellen kann. Eine Theorie, welche die Verknüpfungen von Eingabe und Ausgabe zu beschreiben versucht, ohne dabei die innere Struktur des Systems zu erforschen oder die im Inneren wirkenden Mechanismen nicht im Detail kennt, dieses also als eine Art „black box“ behandelt, wird phänomenologische Theorie genannt.

An dieser Stelle ist es wichtig zu erwähnen, dass sowohl die stark heterogenen mikrostrukturellen Einheiten, aus denen spezielle neu entwickelte Werkstoffe aufgebaut sind, als auch die mikroskopisch kleinen mechanischen Bauteile aus fast denselben elementaren materiellen Objekten (bspw. Kristalle, Körner usw.) bestehen, welche sowohl räumlich-geometrisch ähnliche Ausdehnungen aufweisen als auch physikalisch und chemisch mehr oder weniger identische Eigenschaften zeigen. Aufgrund dieser Verbindung ist es offensichtlich, dass ein Stoffmodell, welches in einem der beiden Anwendungsgebiete erfolgreich eingesetzt werden kann, in den meisten Fällen auch für das jeweils andere Feld Verwendung finden kann, wodurch ein überaus großer Bereich für technisch-wirtschaftliche Applikationen gegeben ist. Wie bereits mehrmals erwähnt, sind die herkömmlichen phänomenologischen Theorien in ihrer konventionellen Darstellung, wie die klassisch makroskopische Materialtheorie der Kontinuumsmechanik, für diese sehr kleinen elementaren materiellen Objekte nicht mehr direkt anwendbar und müssen durch entsprechende Ansätze erweitert werden. Deshalb werden zur quantitativen Beschreibung oft Theorien verwendet, welche die Strukturen auf der Mikroebene in ausreichendem Maß beschreiben und anschließend mittels speziellen Methoden in den Rahmen der klassischen Kontinuumsmechanik miteinbeziehen, woraus erweiterte oder höhere Theorien der Kontinuumsmechanik resultieren. Die so erhaltenen Modelle sind mikrostrukturell motiviert und können deshalb essentielle Größen auf diesen kleinen Ebenen (Skalen) abbilden sowie darüber hinaus das makroskopische Verhalten gut beschreiben. Sie weisen allerdings meist in ihrer mathematischen Komplexität etwas unhandlichere Formen auf als die klassisch phänomenologischen Ansätze, welche jedoch für die erwähnten Problemklassen nicht oder in nur sehr eingeschränktem Maße anwendbar sind. Ein weiterer wichtiger Nebenaspekt stellt die mikromechanische Erklärung makroskopischer Phänomene dar, welche durch diese erweiterten bzw. höheren Theorien der Kontinuumsmechanik möglich ist.

1.2 Wissenschaftliche Entwicklung und Stand der Forschung

Ausgehend von einer kurzen chronologischen Darstellung über die Entwicklung nichtlokaler kontinuumsmechanischer Werkstoffmodellierung sowie den damit eng verbundenen materialwissenschaftlichen Beschreibungen soll ein Überblick über den momentanen Stand der Forschung sowie physikalisch-motivierter Beschreibungen von Materialverhalten im Kontext lokaler, besonders aber nichtlokaler kontinuumsmechanischer Theorien gegeben werden. Dieser Abschnitt erhebt keinesfalls den Anspruch auf Vollständigkeit und beschränkt sich deshalb hauptsächlich auf das Deformationsverhalten dünner metallischer Schichten, das auch Schwerpunktthema der vorliegenden Arbeit darstellt.

Im Laufe der wissenschaftlichen Entwicklung hat sich gezeigt, dass nichtlokale kontinuumsmechanische Theorien eine effiziente und geeignete Methode darstellen die im vorigen Kapitel (1.1 Motivation) beschriebenen Probleme mathematisch-physikalisch zu modellieren. Historisch betrachtet kann man den Beginn einer systematischen Entwicklung nichtlokaler Theorien auf die Arbeiten und oft zitierte Publikation der Brüder Cosserat (Cosserat & Cosserat, 1909) zurückverfolgen. Bei dieser rein phänomenologischen Beschreibungsweise versucht man, die mikroskopischen Effekte im Materialverhalten ausschließlich mit den Mitteln der Kontinuumsmechanik zu erfassen. Im Zusammenhang dieser Theorie folgten eine Reihe weiterer wissenschaftlicher Veröffentlichungen, sowohl für Fluide als auch für feste Werkstoffe, welche zwar Fortschritte auf diesem Gebiete erbrachten, jedoch keine fundamentalen Neuerungen nach sich zogen. Bedeutende Arbeiten in diesem Kontext stellen jene von Mindlin (Mindlin, 1963), (Mindlin, 1964) und Eringen (Eringen, 1964) dar, welche die Cosserat-Theorie aufgriffen und vorschlugen, das Material als ein (Makro-)Kontinuum mit einer intrinsischen Mikrostruktur (sog. Mikrokontinuum) zu beschreiben. Die Mikrostruktur stellt dabei einen deformierbaren Körper dar, der an den betrachteten materiellen Punkt angeheftet wird. Dabei ist es wichtig zu erwähnen, dass linear-elastische Theorien, welche jenen von den Brüdern Cosserat vorgeschlagenen Ansatz verwenden, bereits relativ

früh einen hohen Entwicklungsstand erreichten, wohingegen Plastizitätsmodelle aufgrund der Komplexität und der eher geringen Anwendungsrelevanz erst deutlich später formuliert wurden. Erste Arbeiten zur Cosserat-Plastizität erschienen gegen Ende der 60er (Lippmann, 1969) und zu Beginn der 90er (Diepolder, Mannl, & Lippmann, 1991) Jahre des 20. Jahrhunderts. Oftmals werden auch die Ausdrücke mikromorph oder mikropolar in Zusammenhang mit phänomenologischen Kontinuumstheorien verwendet, wobei durch Angabe dieser Termini zum Ausdruck gebracht werden soll, dass es sich bei Modellen dieses Typs um bestimmte verallgemeinerte oder spezielle Formen des Cosserat-Ansatzes handelt. Einen guten Überblick über den momentanen Stand der Forschung sowie Varianten und Möglichkeiten von rein phänomenologischen Theorien höherer Ordnung findet man in (Forest & Sievert, 2003).

Ein anderer Zugang zur Beschreibung des Werkstoffverhaltens ist jener über die Materialwissenschaften, worin das makroskopische Stoffverhalten meist aus Theorien bzw. Modellen erklärt wird, welche im Wesentlichen auf die Mikrostruktur der Materie Bezug nehmen. Dabei war und ist insbesondere der kristalline Aufbau von Metallen von großem Interesse, weshalb sich in den 1920iger Jahren viele Untersuchungen von Festkörperphysikern stark darauf konzentrierten. Erstmals wurde von Prandtl (Prandtl, 1928) ein Ansatz über mögliche Fehler in der sonst regulären Gitterstruktur beschrieben, welcher unterschiedliche Verhaltensweisen von Metallen erklärbar machte. In diesem Zusammenhang sind die fundamentalen Ideen von Orowan (Orowan, 1934), Polanyi (Polanyi, 1934) sowie Peierls (Peierls, 1940) und Taylor (Taylor, 1943) zu nennen, welche plastische Verformungen von Metallen mit Hilfe des Konstrukts der Versetzung erklärten bzw. Abschätzungen über deren Ausdehnung machten. Weitere in diesem Kontext wichtige Theorien folgten, welche das atomistisch-diskrete Versetzungsmodell aufgriffen und erweiterten bzw. weiter verfeinerten. Die wichtigsten Arbeiten stellen dabei sicherlich die Publikationen bezüglich einer diskreten elementaren Versetzungstheorie (Cottrell, 1949) oder zur Erklärung eines Vervielfältigungsmechanismus von Versetzungen (Frank & Read, 1950) sowie zur Geometrie von Versetzungen (Nye, 1953) dar. Erst in den späten 40iger und anfänglichen 50iger Jahren des 20. Jahrhunderts begann man Erkenntnisse aus der Festkörperphysik, die aus den zuvor genannten Überlegungen und Ansätzen bezüglich der diskreten Werkstoffmikrostruktur resultierten, in den Zusammenhang der Kontinuums- bzw. Feldtheorie der Mechanik zu stellen. Modelle zur Bewegung (Eshelby, 1949) und Spannungswechselwirkungen (Peach & Koehler, 1950) sowie über induzierte Eigenspannungen bzw. ganze Kontinuumstheorien von Versetzungen (Kröner, 1958) stellen für die damalige Zeit wichtige zukunftsweisende Arbeiten dar, auf die heutige moderne Theorien oftmals Bezug nehmen bzw. auf welchen diese in den meisten Fällen aufbauen. Eine Verbindung zu dem rein phänomenologisch motivierten Cosserat-Modell stellte Kröner (Kröner, 1958) durch den Nachweis her, dass mit gegebenen Versetzungsdichten auch die sogenannten Krümmungen des Cosserat-Kontinuums gegeben sind. Ein ebenfalls in diesem Zusammenhang stehendes, jedoch chronologisch betrachtet singuläres Modell stellt jenes von Burgers (Burgers, 1939), (Burgers, 1939) dar, der in einer bedeutsamen und sehr früh erschienenen Arbeit bereits eine Elastizitätstheorie singulärer Versetzungen im Kontinuum geschaffen hat, nach welcher Eigenspannungen, herrührend von der diskreten Beschreibung von Versetzungen, berechnet werden konnten. Diese Theorie basiert auf einer ebenso sehr früh publizierten Veröffentlichung von Volterra (Volterra, 1907), in welcher bereits das Versetzungskonstrukt in etwas modifizierter Form, nämlich als sogenannte Distorsion, eingeführt worden ist, womit die Beschreibung von Gitterfehlern nicht nur auf die oben genannten Autoren (Prandtl, 1928), (Orowan, 1934), (Polanyi, 1934), (Taylor, 1943) etc. rekuriert werden kann. Ausgehend von bereits zuvor zitierten Arbeiten, welche meist isolierte oder reduzierte Eigenschaften von diskreten mikrostrukturellen sowie werkstoffphysikalisch motivierten Konstrukten bzw. Objekten wie bspw. Versetzungen, Kristalle, Körner etc. qualitativ und teilweise auch quantitativ beschreiben, entwickelte man daraus nach und nach weitere immer komplexere nichtlokale kontinuumsmechanische Modelle zum Materialverhalten geometrisch kleiner und kleinster Körper (Bauteile). Dazu ist es notwendig Theorien auf unterschiedlichen Ebenen (Skalen) miteinander in Verbindung zu bringen, woraus die sogenannte mehrskalige Material- bzw. Stoffmodellierung sich entwickelte, die gegenwärtig ein oft verwendetes Konzept darstellt. Eine andere Motivation, die Entwicklungen, Theorien sowie Zusammenhänge innerhalb der materialwissenschaftlichen Disziplin genauer kennenzulernen, ist darin gegeben, dass durch Analogieschlüsse abstrakte phänomenologische Modelle physikalisch anschaulich und somit begründbar interpretiert werden können, oder aber auch umgekehrt durch physikalisch-materialwissenschaftliche Betrachtungen zusätzliche Ideen für verallgemeinerte Kontinuumstheorien zur Stoffmodellierung überhaupt zu erhalten.

In den beiden letzten Dekaden des 20. Jahrhunderts wurden vermehrt sogenannte gradientenbasierte Materialmodelle eingeführt. Prinzipiell wird dabei der Gradient einer kinematischen Größe, die den De-

formationszustand in ausreichender Weise charakterisiert, als zusätzliche Variable in das Materialmodell eingeführt. Daraus ist unmittelbar ersichtlich, dass es sich bei diesem Ansatz um eine nichtlokale Theorie handeln muss, weil Änderungen im Gradienten im Allgemeinen auch Variationen in einem infinitesimalen Gebiet (Nachbarschaft) um den betrachteten (materiellen) Punkt bewirken. Damit wäre auch schon der wesentliche Ansatz beschrieben, jedoch können bei etwas genauerer Betrachtung dieser Theorien fundamentale Unterschiede in der Einführung bzw. Motivation bezüglich einer Notwendigkeit der zusätzlichen Gradienten und den damit verbundenen intrinsischen Längen festgehalten werden. Die beiden in diesem Kontext wichtigsten Herangehensweisen zur Formulierung lokaler gradientenbasierter Modelle werden im Folgenden kurz skizziert.

- Theorien, welche die Norm des Gradienten von Verzerrungstensoren zusätzlich einführen. Die einfachste Form dieses Ansatzes verknüpft additiv das Produkt aus der Norm des Gradienten der Verzerrung und einer einzelnen intrinsischen Länge mit der Verzerrungsnorm zu einem neuen effektiven Verzerrungsmaß. Mittels dieser neu definierten effektiven kinematischen Größe wird dann das konstitutive Materialmodell formuliert. Ansätze dieses Typs gehen auf Arbeiten von Aifantis (Aifantis, 1984) und anderen Autoren, welche dieses Konzept aufgriffen und weiter entwickelten, zurück. Innerhalb dieser Theorien können wiederum zwei wesentliche Formulierungen hinsichtlich elastisch-plastischer Materialmodellierung unterschieden werden.
 - Ansätze, bei denen die Fließbedingung direkt als Funktion von Gradienten jener Größen abhängen, welche die kinematischen Deformationen quantifizieren (bspw. Verzerrungsgradienten). Die meisten Arbeiten auf eben erwähntem Gebiet verwenden diese Variante der Modellierung, wobei hierzu sehr Bemerkenswertes in (de Borst & Mühlhaus, 1992), (Pamin, 1994) und (Ramaswamy & Aravas, 1998) zu finden ist.
 - Ansätze, bei denen mittels Evolutionsgleichungen der inneren Variablen, welche unmittelbar die Ver- bzw. Entfestigungsparameter determinieren, Gradienten der kinematischen Deformationsgröße (bspw. Verzerrungsgradienten) zusätzlich eingeführt werden. Eine sehr erwähnenswerte Arbeit, welche diesen Ansatz speziell für FEM Simulation im Detail beschreibt, findet man bei (Ramaswamy & Aravas, 1998).
- Theorien, welche den Krümmungstensor miteinbeziehen und dadurch Rotationen im Kontinuum berücksichtigen. Aus der Definition der Krümmung ist sofort erkennbar, dass diese zweite Ableitungen des Verschiebungsfeldes beinhalten, die somit einen Verzerrungsgradienten als gesamte tensorwertige Größe repräsentieren. Dieser Ansatz stellt ein mikrostrukturell motiviertes Modell (Fleck, Muller, Ashby, & Hutchinson, 1994) dar, das – vereinfacht ausgedrückt – durch Verwendung einer Krümmungsnorm (analoge Definition zur effektiven Verzerrung) in den Rahmen einer bereits von Toupin (Toupin, 1962), (Truesdell & Toupin, 1960) und Mindlin (Mindlin, 1963), (Mindlin, 1965) entwickelten höheren – rein phänomenologischen – Kontinuumstheorie eingebaut ist. Weitere modifizierte Ansätze folgten, welche entweder verallgemeinerte konjugierte Spannungsgrößen höherer Ordnung bezüglich des Verzerrungsgradienten (Fleck & Hutchinson, 1997) einführen oder aber auch die Koeffizienten, welche physikalisch intrinsische Längen repräsentieren, mittels unterschiedlicher Ansätze ermitteln. Ansätze dieses Typs wurden erstmals von Fleck und Hutchinson (Fleck & Hutchinson, 1993) in den frühen 90iger Jahren eingeführt, wobei die grundlegende Idee zur Verwendung von Verzerrungsgradienten bzw. die damit verbundenen Krümmungen oder Rotationen aus Überlegungen aus der Versetzungstheorie begründbar ist.

Einen weiteren bereits erwähnten Ansatz, welcher mit den dargestellten Modellen enger in Beziehung steht, stellt die sogenannte „Couple-Stress“-Theorie (Mindlin, 1964) dar. Auf diese Theorie rekurrieren alle hier oben erwähnten Beschreibungsansätze, in denen das „Couple-Stress“-Modell meist als Verallgemeinerung oder aber auch als Spezialfall in Zusammenhang gesehen wird.

Alle hier kurz vorgestellten Theorien, das heißt Modelle, die sowohl auf Cosserat Ansätzen als auch auf Gradiententheorien (Mühlhaus & Aifantis, 1991) basieren, weisen leider eine gemeinsame – physikalisch schwierig interpretierbare – Problematik auf, die mit dem Vorhandensein zusätzlicher Randbedingungen gegeben ist. Im Kontext der hier ansatzweise skizzierten erweiterten Kontinuumstheorien, die fast ausschließlich in Form von Anfangsrandwertproblemen mittels partieller Differentialgleichungssysteme formuliert werden, sind diese weiteren Randbedingungen zur vollständigen Problembeschreibung zwar mathematisch notwendig, können jedoch in einem naturwissenschaftlichen Rahmen, wie bspw. durch physikalisch-werkstoffwissenschaftliche Erklärungsmodelle, nur schwer bis gar nicht interpretiert werden. Darin liegt – neben der Komplexität und dem damit verbundenen Rechenaufwand – sehr

wahrscheinlich einer der Hauptgründe, weshalb erweiterte Theorien zur Quantifizierung und Beschreibung stofflichen Verhaltens im Rahmen ingenieurwissenschaftlicher Probleme momentan nur schwer Einzug halten bzw. Akzeptanz finden, obwohl dieser Modellierungsansatz ein sehr hohes Potenzial sowohl zur quantitativen Beschreibung als auch zur Erklärung verschiedenster Phänomene besitzt.

1.3 Problemstellung, Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Wie sich aus dem Titel der vorliegenden Arbeit ableiten lässt, soll das Deformationsverhalten von sehr dünnen – nur einigen hundert Nanometer dicken –metallischen Kupferschichten auf keramischen Siliziumsubstraten untersucht werden. Die Untersuchungen konzentrieren sich hauptsächlich auf die Möglichkeiten zur werkstoffphysikalisch motivierten Verformungsbeschreibung im Rahmen eines speziellen erweiterten kontinuumsmechanischen Materialmodells im Zusammenhang numerischer Simulationsmethoden. Um das Deformationsverhalten durch das hier verwendete Modell bzw. Simulationsverfahren experimentell verifizieren zu können, stehen grundsätzlich eine eher eingeschränkte Auswahl an Testverfahren (Dual, Simons, Villain, Vollmann, & Weippert, 2004) zur Verfügung. Da die Überprüfung der Simulationsrechnungen ebenfalls ein zentraler Bestandteil dieser Arbeit ist, werden zunächst die experimentellen Methoden zur quantitativen Ermittlung von Materialeigenschaften kurz beschrieben. Soll metallisches Werkstoffverhalten bei Bauteilen, deren geometrische Abmessungen im Mikrometerbereich (Tausendstel Millimeter) liegen, im Experiment untersucht werden, bestehen hierzu mehrere Möglichkeiten.

- Zugexperimente: Diese Methode (Haque & Saif, 2003) ist sicherlich eine der einfachsten, hat aber den entscheidenden Nachteil, dass bei annähernd homogener Belastung keine oder aber verschwindend kleine Gradienten im Verzerrungsfeld vorliegen. Dabei sind Verzerrungsgradienten jedoch die zentralen Größen in den Ansätzen von Gradiententheorien, weshalb Experimente mit homogener Belastung eher ungeeignet zur Verifikation dieser Modelle sind.
- Biegeexperimente: Grundsätzlich finden sich bei Größenordnungen der Biegebalken von nur einigen Mikrometern in der Literatur überraschenderweise sowohl Dreipunkt- als auch Vierpunktbiegeversuche (Stolken & Evans, 1998) sowie experimentelle Untersuchungen einseitig eingespannter Balken bzw. Kragträgern (Haque & Saif, 2003) gleichermaßen beschrieben, obwohl Drei- und Vierpunktbiegeversuche einen deutlich komplizierteren Versuchsaufbau benötigen. Dieser nachteilige Umstand spricht allerdings für die hoch entwickelte Mikrosystemtechnik. Wesentlicher Vorteil beim Drei- und Vierpunktbiegeversuch ist die mathematisch analytisch gut beschreib- und behandelbare Deformation, was zu einer wesentlich verbesserten sowie einfacheren Versuchsauswertung führt.
- Torsionsexperimente: Hier werden die Einspannquerschnitte eines extrem dünnen Drahts gegeneinander verdreht. Literaturstellen, welche auf Experimente Bezug nehmen, die Drähte untersuchen, deren Durchmesser im Mikrometerbereich liegen, finden sich nur sehr selten (Fleck, Muller, Ashby, & Hutchinson, 1994). Versuche, die Torsionsbelastungen auf der Nanoskala durchführen, sind momentan noch nicht publiziert worden. Somit kann davon ausgegangen werden, dass die Versuchsanordnungen für Strukturen, deren charakteristische geometrische Ausdehnungen im Nanometerbereich liegen, momentan technologisch schwer beherrschbar sind.
- Intendationsexperimente: Wie aus dem Namen des Verfahrens bereits erkennbar ist, wird dabei ein Prüfkörper bekannter Geometrie und Steifigkeit, die möglichst groß sein sollte, in die zu untersuchende Struktur, deren Materialverhalten bestimmt werden soll, intendiert. In dieser Hinsicht ist das Verfahren einem konventionellen Härteprüfverfahren sehr ähnlich, wobei die wesentlichen Unterschiede später etwas genauer dargelegt werden (siehe Abschnitt 5.2). Diese experimentelle Untersuchungsmethode findet gegenwärtig wegen seiner Einfachheit am meisten Verwendung, wird aber mit weiterem Voranschreiten der Entwicklung von Mikrosystemtechnik und Nanotechnologie zukünftig von anderen Verfahren abgelöst werden, deren Deformationsfeld mathematisch-analytisch determinierbarer ist als die sehr inhomogene und kaum berechenbare Spannungsverteilung der Nano- bzw. Mikrointendation.

In diesem Zusammenhang ist es auch wichtig zu sagen, dass alle hier aufgezählten Versuche nicht ausschließlich dazu verwendet werden, um für erweiterte Kontinuumstheorien Materialparameter zu ermitteln, sondern auch bei bereits bekannten bzw. vorhandenen Werkstoffparametern, die bspw. aus anderen Theorien abschätz- oder bestimmbar sind, das zu untersuchende Modell weiter zu verifizieren oder aber Materialparameter aufgrund ihrer tatsächlich gemessenen absoluten Größe einer Plausibili-

tätsprüfung im Rahmen grundsätzlicher Überlegungen aus den physikalisch motivierten Werkstoffwissenschaften zu unterziehen. Leider sind nicht alle hier angeführten Prüfmethoden aus messtechnischer Sicht ohne weiteres gleichermaßen beherrschbar, wenn die geometrischen Ausdehnungen der zu untersuchenden Prüfkörper sich im Nanometerbereich (Millionstel Millimeter) bewegen. Um Biege- oder gar Torsionsexperimente in diesen Größenbereichen durchführen zu können, sind spezielle fundierte Erfahrungen auf diesem Gebiet notwendig, weshalb weltweit gesehen nur sehr wenige Institute oder Forschungseinrichtungen überhaupt in der Lage sind, mechanische Tests auf der Nanoskala in brauchbarer und vor allem aber auch reproduzierbarer Güte zur Verifikation von Simulationsmodellen anzubieten. Die hauptsächlichen Schwierigkeiten liegen sicherlich im Aufbringen der genau definierten Belastungszustände sowie in der Sensorik zur quantitativen Erfassung der extrem kleinen Messgrößen innerhalb vorgegebener Genauigkeitsschranken, was bei Strukturen, die nur einige hundert Nanometer groß sind, gegenwärtig – trotz allem technologischen Fortschritts – noch relativ schwer beherrschbar ist.

Als experimentell zwar schwierige, aber mittlerweile gut beherrschte Methode zur Untersuchung von Deformationsverhalten kleinster Strukturen aus dem Nanobereich sowie teilweise auch zur Bestimmung von Parametern für Werkstoffmodelle zur Beschreibung dieser Mikrobauteile, hat sich die Nanoindentation, in den letzten Jahren immer stärker etabliert. Diese ist eine dem Härteprüfverfahren aus der makroskopischen Welt sehr ähnliche Testmethode. Dabei wird jedoch nicht nur – wie beispielsweise bei den bekannten Vickers-, Brinell- oder Rockwellhärteprüfverfahren – die gemessene Eindruckkraft auf die projizierte Fläche als einzelnes quantifizierendes Maß für die Eigenschaft des untersuchten metallischen Werkstoffs ermittelt, sondern der gesamte Kraft-Weg-Verlauf des Prüfkörpers bezüglich der zu untersuchenden Nanostruktur gemessen und aufgezeichnet. Daraus ist es möglich, Werkstoffkennwerte zu ermitteln oder aber auch die aufgezeichneten integralen Kraftverläufe bezüglich der Eindrucktiefe mit Simulationsrechnungen zu vergleichen, um so Verifikationen der verwendeten Modelle durchzuführen, wobei die zuletzt genannte Herangehensweise in dieser Arbeit verwendet wird.

Das wesentlichste und zentrale Thema dieser Arbeit ist aber sicherlich die Simulation und Implementierung eines skalenabhängigen Materialmodells, welches auf gradientenbasierten Ansätzen aufbaut. Speziell handelt es sich dabei um die sogenannte „Mechanism Based Strain Gradient Plasticity“ (kurz MSG) dessen Entwicklung und Varianten im Folgenden kurz umrissen werden soll. Diese Plastizitätstheorie wurde zu Beginn der 1990er Jahre von Fleck und Hutchinson in ihrer ersten Entwicklungsstufe als ein rein phänomenologischer (Fleck & Hutchinson, 1993) Ansatz eingeführt, wobei hierfür das „Couple-Stress“-Modell aus den 1960er Jahren von Toupin (Toupin, 1962) und Mindlin (Mindlin, 1963) aufgegriffen wurde. Erst später wurde die Theorie von denselben Autoren in Zusammenarbeit mit weiteren Forschern aus der Festkörperphysik materialwissenschaftlich motiviert und leicht modifiziert (Fleck, Muller, Ashby, & Hutchinson, 1994). Ausgehend von diesen beiden wichtigen Publikationen wurden dann Arbeiten geschrieben, welche diese sogenannte „Strain Gradient Plasticity“ für spezielle Problemklassen der Mikrosystemtechnik verwendeten. Schließlich wurde diese Theorie in Ihrer eigentlichen Form 1997 sehr detailliert, zusammenfassend sowie verallgemeinert publiziert (Fleck & Hutchinson, 1997). Ausgehend von dieser Arbeit entstanden weitere Modifikationen dieses Modells, wobei der wichtigste Ansatz dieser Art sicherlich die sogenannte „Mechanism Based Strain Gradient Plasticity“ (Gao, Huang, Nix, & Hutchinson, 1999) darstellt, welche in der hier vorliegenden Arbeit hauptsächlich Verwendung findet. Eine Idee in diesem Modell stellt die versetzungstheoretisch motivierte Bestimmung dimensionsloser Koeffizienten bezüglich der Norm des Verzerrungsgradienten dar, wobei diese Koeffizienten vereinfacht ausgedrückt im Wesentlichen mit intrinsischen Längen in Verbindung gebracht werden können. Der wichtigste Ansatz ist aber die mikrostrukturell motivierte Verwendung des Taylor-Modells zur Bewegung von Versetzungen, mit dessen Hilfe über die Äquivalenz der plastisch dissipierten Energie eine Homogenisierung formulierbar ist, woraus wiederum das Konstitutivgesetz als erweiterte Kontinuums-theorie höherer Ordnung abgeleitet wird. Hierbei ist zu erkennen, dass die diskrete Versetzungsbeschreibung in den Rahmen der Kontinuums-theorie eingebettet ist und somit das Modell werkstoffwissenschaftlich sowie mikrostrukturell – wie dies bereits in den Eingangskapiteln allgemeiner dargelegt wurde – motiviert ist. Weiterentwicklungen dieser Theorie folgten, welche speziell Bezug auf eine inkrementelle Formulierung (Qiu, Huang, Wei, Gao, & Hwang, 2003) nehmen, eine nichtlineare Darstellung finiter Deformationsgrößen (Hwang, Jiang, Huang, Gao, & Hu, 2002) oder sogar eine Beschreibung im Rahmen der Kristallplastizität (Han, Gao, Huang, & Nix, 2005) formulieren. Die eben genannten Arbeiten stellen nur die wichtigsten Publikationen zu dieser Theorie dar, wobei durchaus noch weitere Varianten zu finden sind. Trotz all dieser teils sehr komplexen und erweiternden Modifikationen innerhalb dieser Theorie hat sich durchwegs in fast allen Veröffentlichungen gezeigt, dass die Abweichungen

im Rahmen von Biegung, Torsion oder Intendation bezüglich des ursprünglich formulierten Modells (Gao, Huang, Nix, & Hutchinson, 1999), welches einen deformationstheoretischen Ansatz verwendet, gering ist. Nun ist ein wesentlicher Aspekt in der Zielsetzung dieser Arbeit die numerische Simulation des Deformationsverhaltens dünner heterogener metallischer Kupferschichten auf keramischen Siliziumsubstraten. Da nun das Simulationsmodell zur Beschreibung der Verformung mittels Nanoindentation verifiziert wurde, ist wegen der zuvor genannten Gründe, wie beispielsweise die geringen Abweichungen zu anderen komplexeren Modellvarianten im Kontext von Eindruckexperimenten, der deformationstheoriebasierte Ansatz in den Rahmen eines FE-Modells implementiert worden. Aufgrund dieser wohl begründeten Vereinfachung wurde eine vollständige dreidimensionale Simulation der Nanoindentationsexperimente implementiert und rechnergestützt durchgeführt, um so mögliche Effekte besser abbilden zu können, die mittels zweidimensionaler Modelle nicht oder nur reduziert darstellbar sind. An dieser Stelle soll darauf verwiesen werden, dass die hier vorliegende Arbeit trotz der Komplexität in Relation zu konventionellen Kontinuumstheorien erstmals versucht, vollständige dreidimensionale Simulationsrechnungen im Kontext der MSG-Plastizitätsmodelle für Nanoindentationsexperimente durchzuführen, was durchaus einen erwähnenswerten Beitrag zum Fortschritt bezüglich der Diskussionen über Erweiterungen von Theorien dieses Typs liefert. Außerdem ist ein weiterer wichtiger Punkt das Versagensverhalten von solchen heterogenen metallisch-keramischen Film-Substrat-Dünnschichtsystemen zu modellieren, was mit Hilfe von Kohäsivzonenelementen verwirklicht wurde, um so speziell die Möglichkeiten von Grenzflächenablösungen nachzuweisen. Auch in dieser Hinsicht stellt diese Arbeit durchaus den gegenwärtigen Stand der Forschung dar und zeigt die Machbarkeit in Zusammenhang mit dreidimensionaler FEM-Simulationen zum Versagensverhalten metallischer Werkstoffe innerhalb erweiterter kontinuumechanischer Materialmodelle höherer Ordnung auf. Die Arbeit verwendet zwar einerseits eher übliche Herangehensweisen zum Versagen mechanisch belasteter Strukturen mittels Kohäsivzonenmodelle, ist jedoch andererseits durch die vollständige dreidimensionale Modellierung im Kontext gradientbasierter Plastizität ein bemerkenswerter Beitrag zur Simulation von Mikro- und Nanostrukturen gegeben, da gegenwärtig kaum Arbeiten darüber zu finden sind, welche diese Problematik in seiner vollen Komplexität versuchen zu modellieren.

Zum Aufbau des durchgeführten Projekts mit dem Titel „Deformations- und Versagensverhalten von dünnen heterogenen metallischen Schichten auf keramischen Substraten“, in dessen Rahmen diese Arbeit entstanden ist, kann bezüglich der Struktur des Ablaufs Folgendes festgehalten werden:

Die Herstellung der Proben, welche zur Verifikation der Simulationsrechnungen verwendet wurden, erfolgte mit Hilfe von Molekularstrahlepitaxie. Die Probenherstellung erfolgte am materialwissenschaftlichen Fachbereich der TU Darmstadt im Fachgebiet für dünne Schichten. Ebenfalls an dieser Institution wurden die Proben mittels spezieller Verfahren charakterisiert, wobei hierfür das Verfahren der Röntgenbeugung zur Bestimmung der Kristall- bzw. Kornorientierungen Verwendung fand. Im nächsten Schritt wurden die Proben vom Institut für Materialforschung im Forschungszentrum Karlsruhe durch Aufnahmen mittels Rasterelektronenmikroskopie zur Größenabschätzung des mikrostrukturellen Aufbaus weiter begutachtet bzw. untersucht. Im folgenden Bild 1-1 ist die Mikrostruktur einer Cu-Dünnschichtprobe, deren Dicke 100nm beträgt, zu sehen.

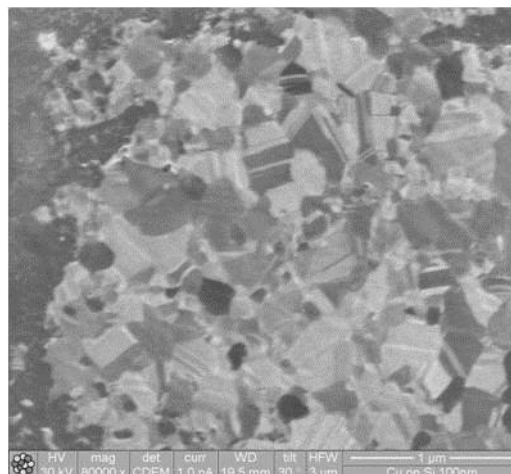


Bild 1-1: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer 100nm dünnen Cu-Schicht (Huber & Schwan, 2004)

Im Folgenden wurden sämtliche Proben einer – bereits in dieser Einleitung kurz beschriebenen – Nanoindentation unterzogen. Die daraus erhaltenen Kurven, welche die integrale Kraft über die Eindringtiefe des Prüfköpers repräsentieren, sind dann zur Verifikation der Simulationsrechnungen herangezogen worden.

2 Theoretische Grundlagen

Ziel dieses Abschnitts ist es, die notwendigen Grundlagen in ausreichender Form darzustellen, wobei stets von einer allgemeineren Betrachtungsweise ausgegangen wird. Ausgehend von dieser eher generalisierten Darstellung werden dann wiederum die in dieser Arbeit verwendeten speziellen Ansätze oder Vereinfachungen abgeleitet. Dadurch sollen die verwendeten Modellgleichungen in einen allgemeineren Kontext gestellt sowie Ansatzpunkte für mögliche Erweiterungen bzw. Verfeinerungen aufgezeigt werden.

Grundsätzlich können verschiedenste Modelle zur Beschreibung von technischen Vorgängen bzw. Prozessen herangezogen werden, wenn diese nur naturwissenschaftlich motiviert sowie ausreichend fundiert beschreibbar sind. Die Physik stellt meist den allgemeinen naturwissenschaftlichen Rahmen dar, mit welchem technische bzw. ingenieurwissenschaftliche Probleme im Maschinenbau beschrieben werden, wobei die Mathematik das wichtigste Hilfsmittel zur quantitativen Darstellung ist. Insbesondere stellt die Mechanik – im Speziellen die Kontinuumsmechanik – die sicherlich wichtigste physikalische Teildisziplin zur Lösung ingenieurwissenschaftlicher Probleme dar.

Der Grund für die vielleicht etwas zu allgemein anmutenden Ausführungen ist, dass zur Beschreibung sehr kleiner Strukturen, deren geometrischen Ausdehnungen Größenordnungen von nur einigen hundert Nanometern aufweisen, diese nicht mehr zwingend als Kontinuum modellierbar sind, sondern durchaus auch als diskrete Systeme beschrieben werden können. Die diskreten Elemente, aus denen solche metallischen Nanostrukturen aufgebaut sind, stellen offensichtlich die Gitteratome des Materials dar, womit durchaus mehr oder weniger berechtigt kein Kontinuum im üblichen Sinn mehr vorläge. Dieser Umstand führte zur Entwicklung der zwei momentan wesentlichsten wissenschaftlichen Gruppen bzw. Strömungen für die Beschreibung von Nanostrukturen. Die eine Vorgehensweise führt über die atomistisch-diskrete Beschreibung zur Modellierung mittels molekulardynamischer Ansätze. Dabei wird jedes Atom in der Modellbeschreibung des Gesamtsystems einzeln abgebildet und mittels Wechselwirkungsgesetzen mit seinen Nachbarn gekoppelt, wobei die Gesamtheit aller diskreten Teile die zu beschreibende komplexe Nanostruktur bilden. Probleme bei dieser Vorgehensweise liegen primär in der geeigneten Wahl von Wechselwirkungsgesetzen sowie in der Festlegung der Nachbarschaften. Außerdem liegen selbst bei Strukturen, deren geometrische Abmessungen sich noch in Größenordnungen von wenigen hundert Nanometern bewegen, eine derart große Anzahl von Atomen vor, dass solche Anordnungen in ihrer Gesamtheit nicht, oder nur partiell, mittels der momentan zur Verfügung stehenden Computerrechenleistung modellierbar sind. Diese Aussage kann sehr einfach durch folgende Überlegung nachvollziehbar gemacht werden. Eine würfelförmige Struktur die aus einer kubisch primitiven Kristallgitteranordnung mit einem Atomradius von ca. 1 Ångström ($1\text{Å}=10^{-1}\text{nm}$) aufgebaut ist und dessen Seitenlänge ca. 200nm beträgt, würde bereits aus $(200\text{nm}/10^{-1}\text{nm})^3=8\cdot 10^9$ Elementen bestehen. Daraus ist sofort ersichtlich, dass selbst in eher kleineren Strukturen – die bspw. für realistische Simulationen von Nanoindentationen bei weitem nicht ausreichen würden – schon eine zu große Anzahl von Atomen notwendig wäre. Dieser Umstand kann aber wiederum nutzbar gemacht werden, indem man die Gesamtheit aller im diskreten System enthaltenen Elemente als ausreichend groß ansieht, sodass ein Herangehen der Modellierung mittels der Kontinuumsmechanik mehr als nur gerechtfertigt ist. Wesentliche Vorteile, welche aus der Nutzung der (erweiterten) klassischen mechanischen Kontinuumsmechanik resultieren, liegen im geringeren Rechenaufwand und vor allem in der Tatsache, dass diese Theorie im Laufe der Zeit als abgesichert und vor allem als sehr bewährt angesehen werden kann.

Um die werkstoffwissenschaftliche Motivation von erweiterten höheren kontinuumsmechanischen Theorien nachvollziehbarer zu gestalten, werden in diesem Abschnitt neben der Kontinuumsmechanik zusätzlich noch metallphysikalischen Grundlagen und Aspekte vorgestellt. Die hier nachfolgenden Abschnitte stellen einleitend einerseits die kontinuumsmechanischen Theorien, andererseits aber auch die wesentlichen werkstoffwissenschaftlichen – zumeist diskreten – Modellvorstellungen, Konstrukte sowie Konzepte überblicksweise dar und erheben keinesfalls den Anspruch auf Vollständigkeit. Für detailliertere Darstellungen wird auf spezielle Literaturstellen (Holzapfel, 2000), (Hutter & Jöhnk, 2004), (Troost, 1980), (Becker & Bürger, 1975), (Hull & Bacon, 1984), (Phillips, 2001) etc. verwiesen.

2.1 Allgemeine Kontinuumsmechanik

Aufgrund der Tatsache, dass die in Abschnitt 1.3 dargelegten Inhalte schwerpunktmäßig über kontinuumsmechanische Modellierungsansätze beschrieben werden, kommen als Erstes die Inhalte der Kontinuumsmechanik etwas genauer zur Sprache. Erst danach erfolgen detailliertere materialwissenschaftli-

che Ausführungen über die wichtigsten zur Verwendung kommenden Theorien, welche auch auf Modelle aus der allgemeinen physikalischen Feldtheorie zurückgreifen.

In der Kontinuumsmechanik ist das zentrale mathematische Hilfsmittel zur Darstellung von Zusammenhängen physikalischer Größen die Tensorrechnung mit zugehöriger Notation. Die Kenntnis dieser ist die einzige mathematische Voraussetzung zum Verständnis dieser Arbeit. Dazu ist einleitend noch zu erwähnen, dass folgende Voraussetzungen und Vereinfachungen angenommen worden sind:

- Mathematische Zusammenhänge sind fast ausschließlich mit Indexnotation dargestellt (Einstein'sche Summennotation, freie bzw. stumme Indizes).
- Da sich ausnahmslos alle hier verwendeten physikalischen Größen auf kartesische Koordinaten beziehen, wurde das Basissystem zur abkürzenden Schreibweise nicht angegeben, weil im kartesischen Koordinatensystem die ko- und kontravarianten Basisvektoren zusammenfallen.
- Sollten Tensoren dennoch in bestimmten Situationen in kompakter bzw. symbolischer Schreibweise dargestellt werden, ist die Stufe dieser mathematischen Objekte durch eine entsprechende Anzahl von Überstrichen gekennzeichnet.
- Indexkontraktionen sind in der kompakten Notation ebenfalls durch eine entsprechende Anzahl horizontaler Punkte dargestellt (auch innere Produkte).

Zur Veranschaulichung dieser Annahmen sei an dieser Stelle ein Beispiel in kompakter, ausführlicher und abgekürzter Indexnotation für Operationen an Tensoren 2. Stufe angeführt.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{C} &= \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \Leftrightarrow \bar{\bar{\mathbf{C}}} = \bar{\bar{\mathbf{A}}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{B}}} \\
 C_{\cdot i}^{\cdot j} \bar{g}_i \otimes \bar{g}^l &= (A_{\cdot j}^{\cdot i} \bar{g}_i \otimes \bar{g}^j) \cdot (B_{\cdot l}^{\cdot k} \bar{g}_k \otimes \bar{g}^l) \\
 &= A_{\cdot k}^{\cdot i} \cdot B_{\cdot l}^{\cdot k} (\bar{g}_i \otimes \bar{g}^l) \\
 C_{il} &= A_{ik} \cdot B_{kl} = A_{ik} \cdot B_{kl}
 \end{aligned} \tag{Rel. 2-1}$$

In den nächsten beiden Abschnitten werden kurz die wichtigsten Aspekt und Prinzipien der allgemeinen Mechanik eines Körpers, der als Kontinuum aufgefasst werden kann, erläutert.

2.1.1 Kinematik

Ausgehend von einem materiellen Körper B , der im dreidimensionalen euklidischen Punktraum und in raumfesten kartesischen Koordinaten mit dem Ursprung 0 abgebildet wird, definiert der Raumbereich R_R zum Zeitpunkt $t = 0 = t_0$ die sogenannte Bezugs- oder Referenzkonfiguration. Jeder materielle Punkt des Körpers wird in der Bezugskonfiguration R_R durch den Ortsvektor X_k räumlich-geometrisch determiniert. Analog nimmt der Körper zum Zeitpunkt $t > 0$ den Raumbereich R_t ein, der als Momentankonfiguration bezeichnet wird. Der materielle Punkt X_k aus der Bezugskonfiguration R_R hat in der zeitabhängigen Momentankonfiguration R_t andere Koordinaten, die einem neuen Ortsvektor x_i zugeordnet werden können. Die Beziehung zwischen X_k und x_i wird durch die folgende Bewegungsgleichung beschrieben:

$$x_i = \hat{x}_i(X_k, t) \tag{Rel. 2-2}$$

Für einen festgehaltenen Zeitpunkt $t = \text{const.}$ existiere eine Umkehrfunktion.

$$X_k = \hat{X}_k(x_i, t) \tag{Rel. 2-3}$$

Daraus resultierend können weitere kontinuumsmechanische Größen abgeleitet werden, wobei es hierfür äußerst hilfreich und zweckmäßig ist, das vollständige Differential der Bewegungsgleichung bezüglich der Abbildung von der Referenz- auf die Momentankonfiguration (Rel. 2-2) zu bilden.

$$dx_i = \frac{\partial \hat{x}_i(X_k, t)}{\partial X_j} \cdot dX_j \tag{Rel. 2-4}$$

Im unbelasteten Zustand nimmt der materielle Körper B eine bestimmte Lage im Raum ein. Durch eine Belastung werden die materiellen Teilchen ihre Lage im Raum verändern, d.h. sie erleiden Verschiebungen, die man durch den Verschiebungsvektor u_k ausdrücken kann. Die Gesamtheit der Verschiebungsvektoren eines belasteten Körpers kennzeichnet den Verschiebungszustand, der durch Translation und Rotation sowie Verzerrung charakterisiert ist. Dabei entspricht die Translation und Rotation der Bewe-

gung eines starren Körpers und die Verzerrung charakterisiert die Verformung bzw. Formänderung des Kontinuums.

Für einen beliebigen, festen Zeitpunkt t wird der Deformationsgradient F_{kl} eingeführt:

$$F_{kl} := \frac{\partial \hat{x}_k(X_i, t)}{\partial X_l} = \text{Grad}(\hat{x}_k(X_i, t)) = \hat{F}_{kl}(X_i, t) \quad (\text{Rel. 2-5})$$

Er stellt eine Abbildungsvorschrift dar, die materielle Linienelemente der Referenzkonfiguration dX_k in materielle Linienelemente der Momentankonfiguration dx_i transformiert (Zweifeldtensor). Deshalb ist es sinnvoll, zur Beschreibung des Bewegungsvorganges in einem Kontinuum den Deformationsgradienten heranzuziehen.

Da der Deformationsgradient jedoch Starrkörperbewegungen beinhaltet, müssen diese abgespaltet werden, um ein sinnvolles Verzerrungsmaß definieren zu können und so einen Zugang zu Verzerrungstensoren zu finden. Dies kann durch polare Zerlegung des Deformationsgradienten in ein Produkt erfolgen. Nimmt man nun $\det F_{kl} > 0$ an, so existiert eine eindeutige polare Zerlegung des Deformationsgradienten

$$F_{kl} = R_{ki} \cdot U_{il} = V_{ki} \cdot R_{il} \quad (\text{Rel. 2-6})$$

in einen eigentlich orthogonalen Rotationstensor R_{kl} , dessen Eigenschaften mit

$$(R_{kl})^{-1} = (R_{kl})^T = R_{lk} \quad (\text{Rel. 2-7})$$

festgelegt sind, und einen symmetrischen positiv definiten rechten

$$(U_{kl})^2 := U_{ki} \cdot U_{il} = (F_{ki})^T \cdot F_{il} = F_{ik} \cdot F_{il} =: C_{kl} \quad (\text{Rel. 2-8})$$

bzw. linken Strecktensor

$$(V_{kl})^2 := V_{ki} \cdot V_{il} = F_{ki} \cdot (F_{il})^T = F_{ik} \cdot F_{li} =: B_{kl} \quad (\text{Rel. 2-9})$$

die jeweils mit U_{kl} bzw. V_{kl} gekennzeichnet werden. Die Tensoren C_{kl} bzw. B_{kl} werden in analoger Weise als rechter bzw. linker Cauchy-Green-Tensor bezeichnet. Die Berechnung der Wurzelfunktion eines Tensors 2. Stufe zur Bestimmung von U_{kl} bzw. V_{kl} ist wegen der Symmetrie und der positiven Definitheit stets durchführbar. Wobei hier kurz erwähnt werden soll, dass die Auswertung allgemeiner tensorieller Funktionen schwierig sein kann, da geschlossene Formen nur mittels der Eigenwerte darstellbar sind und Potenzreihen relativ großen numerischen Rechenaufwand erfordern. Dies gilt besonders für Tensoren höherer Stufe bzw. deren Ableitungen.

Im Folgenden wird noch kurz auf Verzerrungen eingegangen. Dazu werden die Quadrate eines Linienelements des Kontinuums im belasteten und unbelasteten Zustand miteinander verglichen. Dann stellt die Differenz zweier infinitesimal benachbarter Punkte in der aktuellen Konfiguration und in der Referenzkonfiguration ein geeignetes Verzerrungsmaß

$$\Delta := \frac{1}{2}(dx_i \cdot dx_i - dX_k \cdot dX_k) \quad (\text{Rel. 2-10})$$

dar, das Aufschluss über den Verzerrungszustand in unmittelbarer Umgebung eines betrachteten Punktes geben kann. Dabei muss die Forderung der Forminvarianz bei der Definition eines Verzerrungsmaßes stets erfüllt sein. Durch elementare Rechnung kann gezeigt werden, dass

$$\Delta = dx_i \cdot e_{ik} \cdot dx_k \quad \text{mit} \quad e_{ik} := \frac{1}{2}(\delta_{ik} - F_{li}^{-1} \cdot F_{lk}^{-1}) \quad (\text{Rel. 2-11})$$

gilt, wobei die Größe e_{ij} als (Almansi-) Verzerrungstensor bezüglich des (Rel. 2-10) definierten Verzerrungsmaßes Δ , bezeichnet wird. An dieser Stelle ist es wichtig darauf hinzuweisen, dass die verschiedenen Verzerrungstensoren sich stets auf bestimmte Konfigurationen des Kontinuums beziehen. Es kann nämlich manchmal sinnvoll sein, neben der bisher erwähnten aktuellen Konfiguration und der Referenzkonfiguration, noch dazwischenliegende einzuführen. Diese spielen sowohl in der Plastizität großer (finiter) Deformationen eine Rolle, bei welcher eine zusätzliche dritte Zwischenkonfiguration eingeführt wird, als auch in der darauf aufbauenden Kristallplastizität, bei der sogar noch ein weiterer vierter zu beschreibender Deformationszustand hinzukommt.

Des Weiteren ist noch darauf zu verwiesen, dass bei der nichtlinearen kinematischen Theorie am mathematischen Ausdruck, welcher die Verzerrung darstellt, keine Vereinfachung wie bei der linearen Theorie durchgeführt wird, sondern in seiner allgemeinen Form weiter Anwendung findet. Das kann mit elementarer Rechnung anhand des durch den Deformationsgradienten darstellbaren Verschiebungsgradienten H_{ik}

$$F_{ik} := \frac{\partial x_i}{\partial X_k} = \frac{\partial (X_i + u_i)}{\partial X_k} = \delta_{ik} + \frac{\partial u_i}{\partial X_k} = \delta_{ik} + H_{ik} \quad \text{mit} \quad H_{ik} := \frac{\partial u_i}{\partial X_k} \quad (\text{Rel. 2-12})$$

und der Definition des Green-Lagrangeschen-Verzerrungstensors E_{ij} gut verdeutlicht werden.

$$\begin{aligned} E_{ik} &:= \frac{1}{2} ((F_{il})^T \cdot F_{lk} - \delta_{ik}) = \frac{1}{2} (C_{ik} - \delta_{ik}) = \frac{1}{2} ((\delta_{il} + H_{il})^T \cdot (\delta_{lk} + H_{lk}) - \delta_{ik}) \\ E_{ik} &= \frac{1}{2} (H_{ik} + H_{ki} + H_{li} \cdot H_{lk}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-13})$$

Wichtig ist dabei, diese Nichtlinearität von der ebenfalls nichtlinearen multiplikativen Aufspaltung des Deformationsgradienten zu differenzieren. In sehr vielen Fällen kann der Verschiebungsgradient als klein angenommen werden $\|H_{ij}\| \ll 1$. So werden bei vielen technisch relevanten Bauteilen aus metallischen Werkstoffen Werte in der Größenordnung von 10^{-2} bezüglich H_{ij} kaum überschritten, weshalb die Einführung eines linearisierten Verzerrungstensors zweckmäßig ist, da Terme zweiter oder höherer Ordnung des Verschiebungsgradienten bei kleinen Werten vernachlässigbar sind.

$$E_{ik} = \frac{1}{2} \left(H_{ik} + H_{ki} + \underbrace{H_{li} \cdot H_{lk}}_{\ll 1} \right) \approx \frac{1}{2} (H_{ik} + H_{ki}) = \frac{1}{2} (H_{ik} + (H_{ik})^T) =: \varepsilon_{ik} \quad (\text{Rel. 2-14})$$

Oftmals unterliegen Deformationen bestimmten Zwangsbedingungen, welche sich je nach Problemstellung durch bestimmte Modifikationen der die Kinematik beschreibenden Gleichungen berücksichtigen lassen. Eine der wichtigsten Zwangsbedingungen stellt die Inkompressibilität von bestimmten Materialklassen dar, die sich bereits in der Kinematik durch eine Zusatzgleichung beschreiben lässt.

$$J := \det(F_{ij}) = 1 \quad (\text{Rel. 2-15})$$

Die multiplikative Aufspaltung des Deformationsgradienten

$$F_{ij} = J^{\frac{1}{3}} \cdot \hat{F}_{ij} \Leftrightarrow \hat{F}_{ij} = J^{-\frac{1}{3}} \cdot F_{ij} \quad (\text{Rel. 2-16})$$

führt zu einer a priori Erfüllung der Volumenkonstanz von \hat{F}_{ij} , da offensichtlich die Determinante für diese Größe stets 1 ist.

$$\det(\hat{F}_{ij}) = \det\left(J^{-\frac{1}{3}} \cdot F_{ij}\right) = \left(J^{-\frac{1}{3}}\right)^3 \cdot \det(F_{ij}) = J^{-1} \cdot J = 1 \quad (\text{Rel. 2-17})$$

Für andere Tensoren, die ebenfalls mittels des Deformationsgradienten definiert sind, können analoge Größen definiert werden, wobei dies exemplarisch am Tensor C_{kl} hier gezeigt wird.

$$C_{ij} = F_{ki} \cdot F_{kj} = J^{\frac{1}{3}} \cdot \hat{F}_{ki} \cdot J^{\frac{1}{3}} \cdot \hat{F}_{kj} = J^{\frac{2}{3}} \cdot \hat{F}_{ki} \cdot \hat{F}_{kj} = J^{\frac{2}{3}} \cdot \hat{C}_{ij} \Leftrightarrow \hat{C}_{ij} = J^{-\frac{2}{3}} \cdot C_{ij} \quad (\text{Rel. 2-18})$$

Diese – in der nichtlinearen Kinematik – multiplikative Aufspaltung von F_{ij} in einen dilatorischen bzw. volumenerhaltenden Anteil (J) und einen volumenerhaltenden Anteil (\hat{F}_{ij}) entspricht der additiven Zerlegung des Verzerrungstensors

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^d + \frac{\varepsilon_{kk}}{3} \cdot \delta_{ij} \Leftrightarrow \varepsilon_{ij}^d = \varepsilon_{ij} - \frac{\varepsilon_{kk}}{3} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 2-19})$$

in einen deviatorischen ε_{ij}^d und einen volumetrischen $\varepsilon_{ij}^v := (\varepsilon_{kk}/3) \cdot \delta_{ij}$ Part im Kontext der linearen infinitesimalen Kinematik.

Die Abhängigkeit der Deformation von der Zeit muss in nichtlinearen Problemstellungen dann berücksichtigt werden, wenn entweder das Material viskoses Verhalten besitzt (z.B. Plastizität oder Viskoelastizität) oder aber wenn der gesamte Prozess dynamischer Natur ist. Zu diesem Zweck wird hier die Zeitableitung des Deformationsgradienten angegeben. Mit Hilfe von (Rel. 2-2), (Rel. 2-3) sowie durch Ver-

tauschung der Differentiationsreihenfolge und Anwendung der Kettenregel kann aus der Definition des Deformationsgradienten (Rel. 2-5) gezeigt werden,

$$\dot{F}_{kl} := \frac{\partial F_{kl}}{\partial t} := \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \hat{x}_k(X_i, t)}{\partial X_l} = \frac{\partial}{\partial X_l} \frac{\partial \hat{x}_k(X_i, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X_l} \hat{V}_k(X_i, t) = \frac{\partial \hat{V}_k(X_i, t)}{\partial X_l} = \text{Grad} \left(\hat{V}_k(X_i, t) \right) \quad (\text{Rel. 2-20})$$

$$\hat{V}_k(X_i, t) = \hat{V}_k(\hat{X}_i(x_j, t), t) =: \hat{v}_k(x_i, t) = \hat{v}_k(\hat{x}_i(X_j, t), t)$$

dass folgender mathematischer Zusammenhang gilt.

$$\begin{aligned} \dot{F}_{kl} &= \frac{\partial \hat{V}_k(X_i, t)}{\partial X_l} = \frac{\partial \hat{v}_k(x_i, t)}{\partial X_l} = \frac{\partial \hat{v}_k(x_i, t)}{\partial x_r} \cdot \frac{\partial \hat{x}_r(X_j, t)}{\partial X_l} = \frac{\partial \hat{v}_k(x_i, t)}{\partial x_r} \cdot F_{rl} \\ l_{kr} &:= \frac{\partial \hat{v}_k(x_i, t)}{\partial x_r} = \dot{F}_{kl} \cdot F_{lr}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-21})$$

Darin wird l_{kr} als sogenannter räumlicher Geschwindigkeitsgradient bezeichnet, der auch bei energetischen Betrachtungsweisen eine sehr wichtige Rolle inne hat. In diesem Zusammenhang wird der (räumliche) Geschwindigkeitsgradient l_{ij} häufig bei Definitionen bezüglich verzerrungs- bzw. spannungskonjugierter Größen über die Einführung der sogenannten Spannungsleistung, welche offensichtlich eine auf die Zeit bezogene Arbeitsgröße darstellt, oft verwendet. Wie jeder Tensor kann auch l_{ij} in einen symmetrischen sowie antisymmetrischen Anteil zerlegt werden

$$l_{ij} = d_{ij} + w_{ij} \quad \text{mit} \quad d_{ij} = \frac{1}{2}(l_{ij} + l_{ji}) \quad \text{und} \quad w_{ij} = \frac{1}{2}(l_{ij} - l_{ji}) \quad (\text{Rel. 2-22})$$

worin w_{ij} als Wirbeltensor und d_{ij} als räumliche Verzerrungsgeschwindigkeit bezeichnet wird. Aus der Zeitableitung des Green-Lagrangeschen-Verzerrungstensors E_{ij} und der Definition des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten folgt ein wichtiger Zusammenhang zwischen dem transienten Verhalten der Verzerrungen \dot{E}_{ij} und dem symmetrischen Anteil d_{ij} des Geschwindigkeitsgradienten l_{ij} , der zur Beschreibung viskoser Eigenschaften sowie in der Fluidmechanik eine sehr wichtige Rolle inne hat (vgl. 2.3.1.3 „Viskose Eigenschaften“).

$$\dot{E}_{ik} := \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (F_{li} \cdot F_{lk} - \delta_{ik}) = \frac{1}{2} (\dot{F}_{li} \cdot F_{lk} + F_{li} \cdot \dot{F}_{lk}) = F_{li} \cdot d_{lj} \cdot F_{jk} \quad (\text{Rel. 2-23})$$

Wie bereits im einleitenden Kapitel kurz erwähnt wurde, kann bei plastischen Deformationen nach Entfernung der äußeren Belastungen eine bleibende Verformung festgestellt werden. Deshalb ist es sinnvoll, die gesamte Dehnung bzw. Verformung in einen elastischen Anteil und in einen plastischen Anteil aufzuspalten. Je nach Größe der vorliegenden Verzerrungen kann diese Aufspaltung nach unterschiedlichen Ansätzen erfolgen. Liegen bei dem zu behandelnden Problem kleine Deformationen (bzw. Verzerrungen) vor, ist es ausreichend, eine additive Aufspaltung der Verzerrungen anzusetzen

$$\varepsilon_{kl} := \varepsilon_{kl}^e + \varepsilon_{kl}^p = \varepsilon_{kl}^e + \varepsilon_{kl}^i \quad (\text{Rel. 2-24})$$

wobei das hier angeführte Verzerrungsmaß ε_{kl} ein beliebiges, dem Problem angepasstes, ist. Der vorangestellte Superskript bezüglich p (plastisch) bzw. i (inelastisch) soll nur verdeutlichen, dass dieser Ansatz prinzipiell auch auf anderes Werkstoffverhalten als Plastizität übertragbar ist.

Sind hingegen große Deformationen zu beschreiben, wird häufig eine multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen elastischen (Superskript e) und plastischen (Superskript p) bzw. inelastischen (Superskript i) Anteil angenommen.

$$F_{kl} := F_{kj}^e \cdot F_{jl}^p = F_{kj}^e \cdot F_{jl}^i \quad (\text{Rel. 2-25})$$

Dieser Ansatz kann wiederum auch auf andere Werkstoffmodelle, die bspw. viskoplastische Eigenschaften aufweisen, in analoger Weise übertragen werden. Hier spricht man dann von einem elastischen und inelastischen Anteil der Verformung.

Aus diesem Ansatz ergibt sich die Existenz einer sogenannten Zwischenkonfiguration \hat{R}_t , die in dieser Arbeit meist mit R_e bezeichnet wird. Daraus resultierend kann man sich den gesamten Deformationsvorgang in zwei Teilschritte zerlegt vorstellen. Ausgehend von der Referenzkonfiguration R_R erfolgt zuerst eine rein plastische Deformation in die neu eingeführte Zwischenkonfiguration R_e . Dieser Deformationsanteil soll die Irreversibilität der plastischen Verformung berücksichtigen. Außerdem kann gezeigt

werden, dass der Deformationsgradient $F_{jl}^p (= F_{jl}^i)$, welcher die mathematische Abbildung zwischen R_R und R_e determiniert, sich nicht als Gradient eines Vektorfeldes darstellen lässt, wodurch diese Zwischenkonfiguration nur als eine fiktive Modellvorstellung existiert. Anschließend erfolgt dann eine rein reversible elastische Deformation von der Zwischenkonfiguration R_e in die aktuelle Konfiguration R_t .

In analoger Weise kann man einen rechten Cauchy-Green'schen „Verzerrungstensor“ definieren, der sich jedoch auf die neu eingeführte Zwischenkonfiguration bezieht.

$$C_{ij}^e := (F_{ik}^e)^T \cdot F_{kj}^e = F_{ki}^e \cdot F_{kj}^e \quad (\text{Rel. 2-26})$$

Durch einfache Rechnung kann gezeigt werden, dass

$$\begin{aligned} C_{ij}^e &:= (F_{ik}^e)^T \cdot F_{kj}^e = \left(F_{ir} \cdot F_{rk}^{p-1} \right)^T \cdot F_{ks} \cdot F_{sj}^{p-1} \\ &= \left(F_{ir}^{p-1} \right)^T C_{rs} \cdot F_{sj}^{p-1} = F_{ri}^{p-1} C_{rs} \cdot F_{sj}^{p-1} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-27})$$

gilt.

Weiter kann in Anlehnung zur Definition des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten auch ein entsprechender plastischer Anteil L_{ij}^p eingeführt werden. Damit sind die in der nichtlinearen Materialmodellierung zur Verwendung kommenden wichtigsten kinematischen Größen eingeführt.

2.1.2 Kinetik, Spannung und Konstitutivgesetz

Der vorangegangene Abschnitt beschäftigte sich ausschließlich mit der Darstellung von Bewegungen (bzw. Deformationen) aller Punkte, welche zu dem beschreibenden materiellen Körper gehören, ohne sich dabei um die Ursachen dieser Bewegungen zu kümmern. Die Beschreibung der Ursachen von Deformationen ist Aufgabe der Kinetik, deren Inhalte in diesem Kapitel kurz dargelegt werden. Sie beschreibt die mechanischen äußeren Belastungen auf materielle Körper und vor allem das Antwortverhalten des Körpers auf diese Belastungen. Eine mathematisch-funktionale Verknüpfung der kinetischen mit den kinematischen Größen erfolgt über die Materialgleichung, die häufig auch als Konstitutivgesetz bezeichnet wird, wobei aber auch mittels der Bilanzgleichungen eine Verbindung zwischen Kinematik und Kinetik gegeben ist, auf die allerdings erst im nächsten Abschnitt genauer Bezug genommen wird.

Aus der Anschauung her ist bekannt, dass reale feste aber auch fluide Stoffe wie Metalle, Gummi, Wasser, Luft usw. durch das Vorhandensein und Einwirken äußerer Gegebenheiten wie Zwänge, Belastungen etc. sich mehr oder weniger stark deformieren bzw. ihre ursprüngliche Gestalt ändern. Diese Verformung des als Kontinuum modellierten Körpers wird durch die Bewegungen der materiellen Punkte bzw. aus den daraus abgeleiteten kinematischen Größen beschrieben. Dabei wurden jedoch keine quantitativen Aussagen über jene auf die materiellen Punkte wirkenden Belastungen gemacht, sondern nur deren Bewegungen an sich beschrieben. Die Belastung wird physikalisch üblicherweise durch eine Kraft repräsentiert, wobei die Kraft durch ein im Allgemeinen räumlich verteiltes Vektorfeld darstellbar ist. Da die absolute Größe der Kraft keine Aussage über die lokalen Belastungsbedingungen machen kann, ist es naheliegend, diese Kraft auf eine geometrische Größe zu beziehen. In den technisch-ingenieurwissenschaftlichen Gebieten ist es zweckmäßig und üblich die Kräfte auf Flächen zu beziehen, wobei man diese Größe dann als mechanische Spannung bezeichnet. Es ist offensichtlich, dass ein und dieselbe Kraft auf sehr kleine Querschnitte lokal viel stärkere Belastungen darstellen als auf sehr große Flächen, woraus lokal nur sehr geringe Intensitäten resultieren. Die Spannung stellt somit über die Definition der flächenbezogenen spezifischen Kraft ebenfalls ein Vektorfeld dar. Darin kommt jedoch die Fläche als eine über deren Normalvektor definierte gerichtete Größe vor. Es ist offensichtlich, dass die relative Lage zwischen Kraft- und Flächennormalvektor jeweils quantitativ unterschiedliche Spannungswerte nach sich ziehen. Deshalb ist es mathematisch und physikalisch zweckmäßig, den Spannungszustand der materiellen Punkte des Körpers mittels eines Tensorfeldes 2. Stufe zu beschreiben, wobei hierfür üblicherweise die Symbole σ bzw. σ_{ij} , $\bar{\sigma}$ oder σ_{ij} verwendet werden.

$$\sigma_{ij} := \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-28})$$

Aus dem Einheitsnormalvektor, der offensichtlich die Orientierung bzw. die Lage des Flächenelements determiniert, kann dann die Spannung aus dem sogenannten Cauchy-Theorem errechnet werden.

$$\sigma_i := \sigma_{ij}^T \cdot n_j = \sigma_{ji} \cdot n_j \quad (\text{Rel. 2-29})$$

Als nächster Schritt wird nun der Begriff des Konstitutivgesetzes eingeführt. Es ist nachvollziehbar, dass nach der Definition des Verzerrungsmaßes die Größe des zugeordneten Tensors 2. Stufe lokal vorliegende Belastungszustände an einem materiellen Punkt widerspiegelt, da der Verzerrungstensor die Längenänderungen von infinitesimalen Linienelementen vor und nach der Deformation vergleichend quantitativ beschreibt. Daraus resultiert sofort, den Verzerrungstensor als unabhängige Größe zur Bestimmung von Spannungen heranzuziehen, da offensichtlich aus großen bzw. kleinen lokalen Deformationen auch große bzw. kleine lokale Spannungen resultieren. Die mathematische Vorschrift bzw. das Gesetz, welche die Verknüpfung zwischen Verzerrungs- und Spannungstensor vorschreibt, heißt Konstitutivgesetz und kann in allgemeiner expliziter Form durch

$$\sigma_{ij} := \hat{\sigma}_{ij}(E_{ik}) \quad (\text{Rel. 2-30})$$

angegeben werden. Es gibt aber auch physikalisch motivierte Modelle, bei welchen nur implizite Darstellungsweisen

$$\hat{f}_{ij}(\sigma_{ij}, E_{ik}) = 0_{ij} \quad (\text{Rel. 2-31})$$

möglich sind. Grundsätzlich können Konstitutivgesetze durch Differential- oder Integralgleichungen sowie mit algebraischen Gleichungen formuliert werden, wobei in Abhängigkeit der Problemstellung jede mögliche Kombination aus diesen Äquivalenzrelationen möglich ist. Detaillierte Ausführungen zu dieser Problematik sind im Abschnitt 2.3 angeführt, in dem die wichtigsten Klassen von Werkstoffverhalten beschrieben werden. Unabhängig vom vorliegenden Materialverhalten ist aus dem Gleichgewicht der Momente die Symmetrie des zweistufigen Spannungstensors σ_{ij} nachweisbar.

$$\bar{\sigma} = \bar{\sigma}^T \Leftrightarrow \sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (\text{Rel. 2-32})$$

Ein Material, das sich in allen materiellen Punkten gleich verhält, bezeichnet man homogen, andernfalls ist es inhomogen. Sind die Eigenschaften eines Materials richtungsunabhängig, so nennt man das Material isotrop, bei einer Richtungsabhängigkeit der Eigenschaften bezeichnet man es als anisotrop. Zum Verständnis der folgenden Unterkapitel wird nun kurz auf das einfachste Verhalten, welches durch das lineare Materialgesetz gegeben ist,

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{Rel. 2-33})$$

eingegangen. Darin sind die insgesamt $3^4 = 81$ Koeffizienten des Elastizitätstensors c_{ijkl} konstante Größen. Aus der Symmetrie des Spannungs- und des Verzerrungstensors folgt, dass diese Konstanten nicht unabhängig voneinander sein können, da offensichtlich $c_{ijkl} = c_{jikl}$ sowie $c_{ijkl} = c_{ijlk}$ gelten muss, wodurch sich die Anzahl der c_{ijkl} auf 36 reduziert. Sind weitere physikalisch oder andersartige Eigenschaften einzuhalten bzw. zu beschreiben, kann sich diese Anzahl weiter reduzieren.

Im nächsten Schritt wird die an einem Körper zu verrichtende Arbeit beschrieben, wenn die Gesamtheit seiner Punkte einem bekannten vorgegebenen Deformationsfeld entspricht. Dieses bekannte Deformationsfeld bewirkt eine Änderung der Form des Körpers, weshalb jene Arbeit, die hierfür aufzuwenden ist, im Allgemeinen auch als Formänderungsarbeit bezeichnet wird. Bezieht man diese Formänderungsarbeit auf das Volumen, spricht man von einer spezifischen Formänderungsarbeit, wobei diese Größen unabhängig von dem vorliegenden Konstitutivgesetz sind.

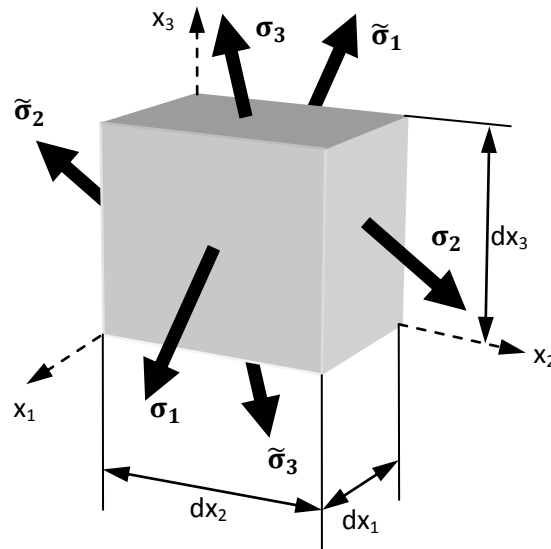


Bild 2-1: Spannungen am infinitesimalen Volumenelement

Um die volumenspezifische Arbeit zu ermitteln, geht man von einem quaderförmigen infinitesimalen Volumenelement aus (siehe Bild 2-1), das aufgrund seiner unendlich kleinen Ausdehnung als materieller Punkt des Körpers bzw. Kontinuums aufgefasst werden kann, wobei zur Problembeschreibung ein orthogonales kartesisches Koordinatensystem (Achsen x_i) Verwendung findet. Dieses Volumenelement wird mittels des Schnittprinzips aus dem Körper gewonnen, wobei sich die resultierenden inneren Spannungen aus dem Cauchy-Theorem mit den in Richtung der Koordinatenachsen wirkenden Flächennormalen ergeben. Nun kann jede an den Flächenelementen wirkende Spannung in 3 Komponenten zerlegt werden, die jeweils parallel zu den orthogonalen Achsen x_i des kartesischen Koordinatensystems wirken, wobei durch Geometrie und relative Lage des Volumenelements jeweils zwei Komponenten tangential in der Fläche $dA_{ij} = dx_i \cdot dx_j$ und eine Komponente normal auf die infinitesimale Fläche dA_{ij} stehen. Dadurch kann jede so bestimmte Komponente mit den Einträgen im zweistufigen Spannungstensor σ_{ij} identifiziert werden, wobei die beiden in dem Flächenelement wirkenden Spannungskomponenten senkrecht aufeinander stehen und reine Schubbelastungen bewirken, wohingegen aus der einzelnen Flächenelementnormalkomponente reine Zug- bzw. Druckbelastungen resultieren. Es ist erkennbar, dass diese aus dem Schnittprinzip resultierenden inneren Spannungskomponenten an dem betrachteten Volumenelement Arbeit verrichten, da diese Größen nach der Definition der Spannungen flächenbezogene spezifischen Kräfte darstellen. Die Richtungen der infinitesimalen Wegelemente, entlang dem diese Spannungskomponenten bzw. Kräfte wirken, entsprechen den Wirkungsrichtungen der angreifenden Belastungen, wobei aus den Gleichgewichtsbedingungen folgt, dass die aus dem Schnittprinzip resultierenden und an gegenüberliegenden Flächen wirkenden Spannungen bzw. deren Komponenten gleich groß, jedoch entgegengesetzt gerichtet sein müssen ($\tilde{\sigma}_k = -\sigma_k$), was der bereits erwähnten Symmetrie ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$) des Spannungstensors entspricht. Betrachtet man nun jeweils ein beliebiges, an den entsprechend gegenüberliegenden Flächen sich im Gleichgewicht befindendes Spannungskomponentenpaar, so folgen für die drei Komponenten mit gleichen Indizes ($i = j$) reine Dehnungen (Bild 2-2 links) sowie für die ebenfalls drei Komponenten ungleicher Indizes ($i \neq j$) reine Scherungen (Bild 2-2 rechts). Da die isoliert im Gleichgewicht betrachteten Paare der Spannungskomponenten jeweils nur einen additiven Beitrag zur infinitesimalen Gesamtarbeit am Volumenelement leisten, wird im Anschluss exemplarisch nur ein Arbeitsanteil eines Normalspannungspaars analytisch hergeleitet, wobei die anderen in völlig analoger Weise bestimmbar sind. Aus der Definition des Verzerrungstensors ε_{ij} führt eine infinitesimale Dehnungsänderung $d\varepsilon_{11}$ zu einer Verlängerung des Volumenelements in Richtung x_1 um den Betrag $ds_1 = \varepsilon_{11} \cdot dx_1$, und damit leistet die aus der Spannungskomponente σ_{11} resultierende Kraft $F_{11} = \sigma_{11} \cdot dA_{23} = \sigma_{11} \cdot dx_2 \cdot dx_3$ das Arbeitsinkrement $dW_{11} = F_{11} \cdot ds_1 = \sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11} \cdot dx_1 \cdot dx_2 \cdot dx_3 = \sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11} \cdot dV$. Bezieht man diesen infinitesimalen Arbeitsanteil auf das differentielle Volumen $dV = dx_1 \cdot dx_2 \cdot dx_3$, so ergibt sich der entsprechende spezifische Arbeitsbeitrag $dw_{11} = dW_{11}/dV = \sigma_{11} \cdot \varepsilon_{11}$.

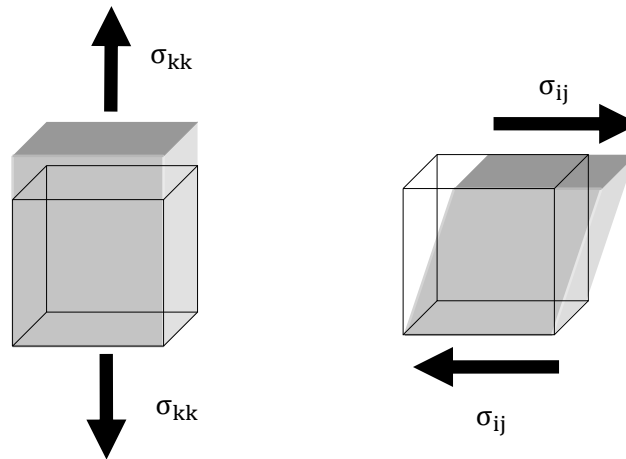


Bild 2-2: Reine Normal- (l) und Tangentialdeformation (r) am infinitesimalen Volumenelement durch isolierte Belastung

Für die anderen Gleichgewichtspaare der Spannungskomponenten werden entsprechende Arbeitsanteile von den zugehörigen Verzerrungsänderungen geleistet und man erhält für die gesamte differentielle Formänderungsarbeit schließlich

$$dw = \sum_{i,j} dw_{ij} = \sigma_{11} \cdot d\varepsilon_{11} + \sigma_{12} \cdot d\varepsilon_{12} + \dots = \sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} \quad (\text{Rel. 2-34})$$

Die Arbeit w , die bei einer Deformation vom verzerrungslosen Ausgangszustand bis zur Momentankonfiguration mit den Verzerrungen ε_{ij} geleistet wird, definiert die spezifische Formänderungsarbeit und ergibt sich durch Integration.

$$w = \int_0^{\varepsilon_{kl}} \sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} \quad (\text{Rel. 2-35})$$

Im Spezialfall eines linearen Konstitutivgesetzes, der bei der Modellierungen auf mikrostruktureller Ebene von eindimensionalen Defektstrukturen (vgl. 2.2.2.1 Versetzungen) eine wichtige Rolle spielt, ist die Arbeit als reversible Energie im Kontinuum gespeichert. Diese Energie wird als spezifische Formänderungsenergie bezeichnet und kann einfach berechnet werden.

$$w = \int_0^{\varepsilon_{mn}} \sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} = \int_0^{\varepsilon_{mn}} c_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \cdot d\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot c_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \cdot \varepsilon_{ij} \quad (\text{Rel. 2-36})$$

Unter Beachtung des Elastizitätsgesetzes erhält man dann die Beziehung

$$w = \frac{1}{2} \cdot c_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \cdot \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \sigma_{ij} \cdot \varepsilon_{ij} \quad (\text{Rel. 2-37})$$

auf welche in nachfolgenden Abschnitten zurückgegriffen wird.

2.1.3 Transformationen tensorieller Größen

Da die Verzerrung eine Funktion des Deformationsgradienten ist, bezieht sich jedes Verzerrungsmaß auf eine bestimmte Konfiguration. Dasselbe gilt für die dem Verzerrungsmaß zugeordnete Spannungsgröße, da diese wiederum eine Funktion der Verzerrung und somit des Deformationsgradienten ist. Daraus folgt, dass Verzerrungen und Spannungen von einer Konfiguration in eine beliebige andere umgerechnet bzw. transformiert werden können, wenn die Transformationsvorschrift zwischen diesen Konfigurationen - die stets durch den Deformationsgradienten determiniert wird - bekannt ist. Deshalb ist im Allgemeinen die Kenntnis des Transformationsverhaltens zwischen differentiellen Größen der Momentankonfiguration und der Referenzkonfiguration wichtig für viele Umformungen bei theoretischen Ableitungen und in den numerischen Anwendungen. Umrechnungen, bei denen Feldgrößen von der Momentankonfiguration in die Ausgangskonfiguration überführt werden, bezeichnet man meist als "pull back" Operationen. Der umgekehrte Vorgang, bei dem man Feldgrößen von der Referenzkonfiguration in die Momentankonfiguration transformiert, wird oft mit "push forward" bezeichnet.

Durch elementare Tensorrechnung kann so beispielsweise der auf die Momentankonfiguration bezogene Almansische Verzerrungstensor e_{ik} in die Ausgangskonfiguration transformiert werden, in welcher derselbe mit dem Green-Lagrangesche Verzerrungstensor E_{ik} identisch ist.

$$E_{ik} = (F_{ij})^T \cdot e_{jl} \cdot F_{ik} = F_{ji} \cdot e_{jl} \cdot F_{ik} \quad (\text{Rel. 2-38})$$

Ähnliche Umformungen sind natürlich auch für Tensoren durchführbar, die Spannungen oder andere physikalische Größen repräsentieren. Dabei ist der physikalische Gehalt dieser tensoriellen Größen nicht geändert (Beobachterinvarianz) worden, sondern nur seine Konfiguration. Aus diesem Grund sollte man sich in den folgenden Kapiteln nicht verwirren lassen, wenn von Spannungs- oder Verzerrungstensoren mit speziellen Namen oder Bezeichnungen gesprochen wird, weil damit nur die Konfiguration implizit bezeichnet wird, auf welche sich die physikalisch-tensorielle Größe bezieht. Als Beispiele seien hier nur der Cauchysche σ_{ik} oder der erste (P_{ij})

$$P_{ij} = \det(F_{ab}) \cdot \sigma_{ik} \cdot (F_{kj}^{-1})^T = \det(F_{ab}) \cdot \sigma_{ik} \cdot F_{jk}^{-1} = J \cdot \sigma_{ki} \cdot F_{jk}^{-1} \quad (\text{Rel. 2-39})$$

und der zweite Piola-Kirchhoffsche (S_{ij})

$$S_{ij} = F_{ik}^{-1} \cdot P_{kj} = F_{ik}^{-1} \cdot \sigma_{kl} \cdot (F_{lj}^{-1})^T = J \cdot F_{ik}^{-1} \cdot \sigma_{kl} \cdot F_{jl}^{-1} \quad (\text{Rel. 2-40})$$

sowie der Kirchhoffsche Spannungstensor (ζ_{ij})

$$\zeta_{ij} = F_{ik} \cdot S_{kl} \cdot F_{jl} = J \cdot \sigma_{ij} \Rightarrow S_{kl} = F_{ki}^{-1} \cdot \zeta_{ij} \cdot F_{lj}^{-1} \quad (\text{Rel. 2-41})$$

aber auch der Almansische Verzerrungstensor e_{ik} genannt. Diese Bezeichnungen sind zwar aus der historischen Entwicklung heraus allgemein üblich und anerkannt, können aber auch Verwirrung stiften, da hierdurch suggeriert wird, dass ein und derselbe Punkt eines deformierten Körpers beispielsweise mehrere unterschiedliche Verformungen aufweist, was aus physikalischer Sicht aufgrund der Eindeutigkeit natürlich falsch ist.

2.1.4 Zeitableitungen

Resultierend aus dem vorherigen Abschnitt bezieht sich jede tensorielle Größe im Kontext finiter Deformationen auf eine bestimmte Konfiguration. Da jedoch jede Deformation in einem zeitlichen Rahmen abläuft, kann die Größe der zeitlichen Änderungen des Deformationszustandes die daraus resultierenden inneren Belastungen (Spannungen) beeinflussen. Deshalb kann es notwendig sein, die beschreibenden Gleichungen in ratenabhängiger Form, d.h. durch deren Zeitableitungen, zu formulieren (vgl. Abschnitte 2.3.1.3, 2.3.1.2 und 2.4). Da sich jedoch viele tensorielle Größen ganz (Cauchyscher Spannungstensor) oder nur teilweise (1. Piola-Kirchhoffscher Spannungstensor) auf die Momentankonfiguration beziehen, welche sich ebenfalls mit der Zeit ändert, sind spezielle Zeitableitungen für diese Größen zu verwenden, damit das Prinzip der materiellen Objektivität (Beobachterinvarianz) stets erfüllt ist (Truesdell & Toupin, 1960). Deshalb sind in der Literatur eine Vielzahl von modifizierten Zeitableitungen, sogenannten objektiven Spannungsraten, zu finden. Eine geometrisch motivierte Zeitableitung ist durch die Lie-Ableitung ($\mathcal{L} \circ$) des entsprechenden Spannungstensors gegeben, welche nachfolgend exemplarisch am Cauchyschen Spannungstensor formuliert sei.

$$\mathcal{L} \circ \sigma_{ij} := F_{ia} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} (F_{ak}^{-1} \cdot \sigma_{kl} \cdot F_{bl}^{-1}) \right] \cdot F_{jb} \quad (\text{Rel. 2-42})$$

Die geometrische Interpretation von (Rel. 2-42) ist dadurch gegeben, dass der sich vollständig auf die Momentankonfiguration beziehende Cauchysche Spannungstensor σ_{kl} zuerst durch die innere Operation $F_{ak}^{-1} \cdot \sigma_{kl} \cdot F_{bl}^{-1}$ auf die zeitunabhängige Referenzkonfiguration transformiert wird. Innerhalb dieser Ausgangskonfiguration erfolgt dann die eigentliche Zeitableitung $\partial/\partial t$ und anschließend die Rücktransformation dieser Spannungsrates in die sich zeitlich ändernde Momentankonfiguration, welche durch die äußere Operation $F_{ia} \cdot [\dots] \cdot F_{jb}$ erfolgt. Unter Verwendung von (Rel. 2-20) bis (Rel. 2-22) und durch weitere Umrechnungen kann (Rel. 2-42) in folgende Darstellung überführt werden,

$$\mathcal{L} \circ \sigma_{ij} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} - l_{ik} \cdot \sigma_{kj} - \sigma_{ik} \cdot l_{jk} =: {}^{\Delta} \sigma_{ij} \quad (\text{Rel. 2-43})$$

wobei diese Beziehung (Rel. 2-43) meist als Oldroydsche Spannungsrates ${}^{\Delta} \sigma_{ij}$ bezeichnet wird und mit der Lie-Ableitung für den Cauchyschen Spannungstensor $\mathcal{L} \circ \sigma_{ij}$ identisch ist. In der Oldroydschen Spannungsrates (Rel. 2-43) bezeichnet die Größe l_{ik} die Geschwindigkeit des Deformationsgradienten, vgl. (Rel. 2-21). Aus der additiven Zerlegung der Geschwindigkeit des Deformationsgradienten, vgl. (Rel. 2-22), lassen sich noch eine Reihe weiterer objektiver Zeitableitungen definieren wie bspw. die Jaumannsche Spannungsrates

$$\nabla \sigma_{ij} := \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} - w_{ik} \cdot \sigma_{kj} + \sigma_{ik} \cdot w_{kj} \quad (\text{Rel. 2-44})$$

die wiederum durch die Lie-Ableitung ausgedrückt werden kann.

$$\mathcal{L} \circ \sigma_{ij} = \nabla \sigma_{ij} - d_{ik} \cdot \sigma_{kj} - \sigma_{ik} \cdot d_{kj} \quad (\text{Rel. 2-45})$$

In der Finiten-Elemente-Methode (FEM) findet auch häufig die sogenannte Ratenformulierung nach Green-Naghdi-McInnis (Doghri, 2000) oder Green-McInnis (Haupt, 2000) Anwendung.

In Abhängigkeit von der Problemstellung ist es oftmals auch nützlich, objektive Zeitableitungen für Verzerrungstensoren zu verwenden. Auch in diesem Fall kann konzeptionell analog wie bei den Spannungstensoren vorgegangen und eine entsprechende Lie-Ableitung definiert werden, welche exemplarisch für den Almansischen Verzerrungstensor (Rel. 2-11), der sich vollständig auf die zeitlich veränderliche Momentankonfiguration bezieht, nachfolgend dargestellt ist.

$$\mathcal{L} \circ e_{ij} := F_{ai}^{-1} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} (F_{ka} \cdot e_{kl} \cdot F_{lb}) \right] \cdot F_{bj}^{-1} \quad (\text{Rel. 2-46})$$

Für die Lie-Ableitung ist wichtig zu erwähnen, dass für die Transformationen zur und aus der Referenzkonfiguration, innerhalb der die eigentliche Zeitableitung durchgeführt wird, die Art des Basissystems des entsprechenden Tensors zu beachten ist, da ein Unterschied zwischen reinen Ko- bzw. Kontravarianten aber auch gemischten Basissystemen besteht, durch die der Tensor determiniert ist. Dieser Umstand wird durch den Vergleich der beiden Beziehungen (Rel. 2-42) und (Rel. 2-46) ersichtlich.

Objektive Zeitableitungen sind natürlich nur bezüglich Tensoren anzuwenden, deren Basissystem sich mit der Zeit ebenfalls ändert, weshalb bei Tensoren, die sich vollständig auf die Referenzkonfiguration beziehen, direkt mit der totalen Zeitableitung operiert werden kann, da das Basissystem der Bezugskonfiguration konstant und somit zeitunabhängig ist. Deshalb kann die objektive Rate des Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors direkt durch die einfache Zeitableitung berechnet und ausgedrückt werden, siehe dazu vgl. (Rel. 2-23). Ebenso kann die Spannungsrate des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors S_{ij} (Rel. 2-40) direkt durch die einfache Zeitableitung bestimmt werden,

$$\dot{S}_{ij} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial t} \quad (\text{Rel. 2-47})$$

da sich diese tensorielle Größe auf die zeitlich konstante und damit unveränderliche Ausgangskonfiguration bezieht, womit dieser Ausdruck (Rel. 2-47) bereits objektiv ist.

Abschließend sei noch die objektive Rate des Kirchhoffschen Spannungstensors, der sich wie der Cauchysche Spannungstensor ebenfalls vollständig auf die zeitlich veränderliche Momentankonfiguration bezieht, vgl. (Rel. 2-41), unter Verwendung der Lie-Ableitung, vgl. (Rel. 2-42), formuliert.

$$\mathcal{L} \circ \varsigma_{ij} := F_{ia} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} (F_{ak}^{-1} \cdot \varsigma_{kl} \cdot F_{bl}^{-1}) \right] \cdot F_{jb} \quad (\text{Rel. 2-48})$$

Aus der Transformationsbeziehung zwischen Kirchhoffschen ς_{ij} und 2. Piola-Kirchhoffschen S_{kl} Spannungstensor, vgl. (Rel. 2-41), und der objektiven Zeitableitungen beider Spannungstensoren (Rel. 2-48) bzw. (Rel. 2-47) kann die Spannungsrate beider Größen

$$\mathcal{L} \circ \varsigma_{ij} := F_{ia} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} (S_{ab}) \right] \cdot F_{jb} = F_{ia} \cdot \left(\frac{\partial S_{ab}}{\partial t} \right) \cdot F_{jb} = F_{ia} \cdot \dot{S}_{ab} \cdot F_{jb} \quad (\text{Rel. 2-49})$$

in Beziehung gebracht werden.

2.1.5 Bilanzgleichungen

In diesem Abschnitt sollen die Bilanzgleichungen in differentieller bzw. lokaler Form eingeführt werden. Die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik beschreiben die mechanischen Wechselwirkungen des materiellen Körpers mit seiner Umgebung infolge der Randbedingungen. Bei diesen Gleichungen handelt es sich im Wesentlichen um:

- I. Massenbilanz
- II. Impulsbilanz
- III. Drehimpuls- bzw. Drallbilanz

IV. Energiebilanz

V. Entropiebilanz

Etwas detaillierter werden nur die ersten beiden behandelt. Bei den übrigen werden nur kurz Erläuterungen ohne mathematischen Formalismus angegeben.

Die Massenbilanz liefert einen Zusammenhang zwischen infinitesimalen Volumenelementen in R_R und R_t . In Lagrangescher Beschreibungsweise ist die Massenerhaltung durch die Beziehung

$$\rho_0 = \det(F_{ij}) \cdot \rho = J \cdot \rho \quad (\text{Rel. 2-50})$$

gegeben, wobei ρ_0 die Dichte der Referenzkonfiguration und ρ die der Momentankonfiguration darstellt. Aus dieser Gleichung erhält man eine Beziehung zwischen den Volumenelementen der Referenz- und Momentankonfiguration.

$$dv = \frac{\rho_0}{\rho} \cdot dV = \det(F_{ij}) \cdot dV = J \cdot dV \quad (\text{Rel. 2-51})$$

Die Impulsbilanz geht, wie die Bezeichnung schon ausdrückt, vom Impuls im physikalischen Sinne aus, der in differentieller Form für ein beliebiges Masseteilchen im betrachteten Kontinuum folgendermaßen

$$dL_i = v_i \cdot dm \quad (\text{Rel. 2-52})$$

definiert ist, worin v_i die Geschwindigkeit repräsentiert. Da für die Impulsbilanz der gesamte Körper betrachtet werden muss, folgt für dieses Kontinuum der Gesamtimpuls

$$L_i = \int_v dL_i = \int_v \rho \cdot v_i \cdot dv = \int_v \rho_0 \cdot v_i \cdot dV \quad (\text{Rel. 2-53})$$

der hier sowohl bezüglich der Momentan- als auch der Referenzkonfiguration angegeben ist. Die Impulsbilanz lautet nun: Die zeitliche Änderung des Impulses ist gleich der Summe aller auf den Körper von außen wirkenden Kräfte. Die äußeren Kräfte sind durch Oberflächen- und Volumenkräfte mit

$$K_i = \underbrace{\int_v \rho \cdot \tilde{b}_i \cdot dv}_{\text{Volumenkräfte}} + \underbrace{\int_{\partial v} \tilde{t}_i \cdot da}_{\text{Oberflächenkräfte}} \quad (\text{Rel. 2-54})$$

gegeben, wobei die mit einer Tilde gekennzeichneten Größen \tilde{b}_i und \tilde{t}_i jeweils die Volumenkraftdichte sowie die Oberflächenkraftdichte darstellen. Durch Gleichsetzen der äußeren Kräfte mit der zeitlichen Änderung des Gesamtimpulses kann die Impulsbilanz in integraler Form geschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} L_i =: K_i \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int_v \rho \cdot v_i \cdot dv = \int_v \rho \cdot \tilde{b}_i \cdot dv + \int_{\partial v} \tilde{t}_i \cdot da \quad (\text{Rel. 2-55})$$

Bei der Anwendung des zeitlichen Differentiationsprozesses auf die räumliche Form des Gesamtimpulses ist allerdings zu beachten, dass die Integrationsgrenzen ebenfalls Funktionen der Zeit sind, weshalb man diese mathematische Operation besser mittels der Lagrange'schen Darstellung durchführt. Nach weiteren mathematischen Umformungen, die im Wesentlichen aus der Anwendung des Gauss'schen Integralsatzes und der Verwendung des Lokalisationssatzes bestehen, kann dann die lokale bzw. differentielle Form der Impulsbilanz in der Momentankonfiguration wie folgt geschrieben werden.

$$\frac{\partial \sigma_{ki}}{\partial x_k} + \rho \cdot \tilde{b}_i = \rho \cdot \frac{\partial v_i}{\partial t} \quad (\text{Rel. 2-56})$$

Die Impulsbilanz ist hier zwar in der Momentankonfiguration angegeben, kann aber auf jede beliebige andere Konfiguration umgerechnet werden. Außerdem fehlen noch die Rand- und Anfangsbedingungen, welche für die Vollständigkeit eines wohlgestellten Problems notwendig sind. Die Randbedingungen können entweder vorgegebene Spannungs-, Verschiebungs- oder aber kompatible Verzerrungsfelder an bestimmten Orten an der Berandung $\partial^u v$ bzw. $\partial^\sigma v$ des betrachteten Körpers mit dem Volumen v sein:

$$u_i = \hat{u}_i(x_k, t) = \tilde{u}_i = \hat{\tilde{u}}_i(x_k, t) \quad \forall (x_k \in \partial^u v \wedge t \geq 0) \quad u_v \cap \sigma_v = 0 \quad (\text{Rel. 2-57})$$

$$\hat{t}_i(x_k, n_l, t) = \sigma_{ik} \cdot n_k = \tilde{t}_i = \hat{\tilde{t}}_i(x_k, n_l, t) \quad \forall (x_k \in \partial^\sigma v \wedge t \geq 0)$$

Bei dynamischen Problemen haben auch Massen- bzw. Trägheitskräfte einen Einfluss auf das Verhalten der Lösung, weshalb hierbei zusätzlich noch Anfangsbedingungen in Form von Geschwindigkeitsfeldern v_i anzugeben sind.

$$u_i = \hat{u}_i(x_k) = {}^0\bar{u}_i = {}^0\hat{\bar{u}}_i(x_k) \quad \forall (x_k \in v \wedge t = 0)$$

(Rel. 2-58)

$$v_i = \hat{v}_i(x_k) = \frac{\partial u_i}{\partial t} = {}^0\bar{v}_i = {}^0\hat{\bar{v}}_i(x_k) \quad \forall (x_k \in v \wedge t = 0)$$

Die Drehimpulsbilanz führt zusammen mit der Impulsbilanz bei klassischen Kontinua dazu, dass der Spannungstensor nur in symmetrischer Form, d.h. $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, auftreten kann. Die Energiebilanz, die durch den 1. Hauptsatz der Thermodynamik determiniert ist, stellt eine weitere Bilanzaussage dar, welche – wie ihr Name schon andeutet – die Erhaltung der Energie eines thermodynamischen Prozesses postuliert. Da die Energiebilanz hier nicht mehr zur Anwendung kommt, sei diese nur verbal zitiert: Die zeitliche Änderung der totalen Energie (Gesamtenergie E) ist gleich der Summe aus mechanischer Leistung P aller äußeren Kräfte und der Wärmezufuhr Q .

Die Entropiebilanz spielt vor allem bei der thermodynamisch-konsistenten Formulierung von Materialmodellen eine Rolle. Die Entropiebilanz ist durch den 2. Hauptsatz der Thermodynamik charakterisiert und stellt eine Ungleichung dar, wobei diese in der Kontinuumsmechanik meist in Form der sogenannten Clausius-Duhem-Ungleichung zur Anwendung kommt.

2.2 Grundlagen zur Kristallstruktur von Metallen

Da in technischen Anwendungen metallische Werkstoffe nach wie vor die am meisten verwendeten Materialien sind, jedoch das Stoffverhalten auf mikroskopischen Skalen sich deutlich komplexer darstellt, ist es notwendig, Konstitutivgesetze aus dem elementaren Aufbau abzuleiten, weshalb in den nachfolgenden Abschnitten der Aspekt der atomaren Mikrostruktur etwas genauer beschrieben wird.

2.2.1 Aufbau und Charakterisierung von Kristallen

Ein Kristall ist eine zumeist anisotrope, komplexe sowie homogene Struktur (siehe Bild 2-3), die aus dreidimensional periodisch angeordneten und gleichen Elementareinheiten (siehe Bild 2-4) besteht. Man bezeichnet diese Basis- bzw. Elementareinheiten als Einheitszelle oder auch Elementarzelle und deren Anordnung als Kristallgitter.

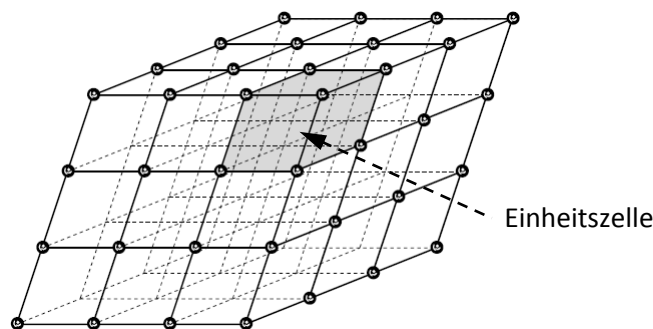


Bild 2-3: Exemplarisches Kristallgitter

Anders ausgedrückt bildet die wiederholte Anordnung von Elementareinheiten in unterschiedliche Raumrichtungen den dreidimensionalen Kristall dar, wobei dieser Umstand durch Bild 2-3 und Bild 2-4 veranschaulicht ist.

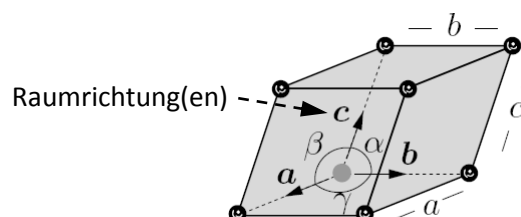
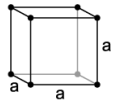
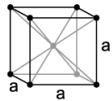
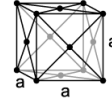
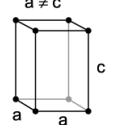
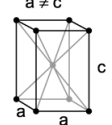
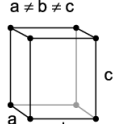
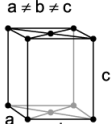
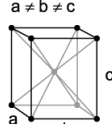
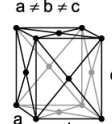
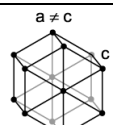


Bild 2-4: Elementare Einheit bzw. Zelle eines Kristallgitters

Das ideale Kristallgitter ist durch verschiedene Raumrichtungen charakterisiert, wobei Einkristalle, welche durch eine einheitliche und homogene sowie ungestörte Kristallstruktur definiert sind, im Allgemeinen stark richtungsabhängige Eigenschaften aufweisen, woraus wiederum die Anisotropie der betrachteten Materialien resultiert. Aus diesem Grunde ist es sinnvoll, Kristallgitter nach ihren Symmetrieeigenschaften zu charakterisieren, um so etwaige Rückschlüsse auf bestimmte Materialeigenschaften, wie beispielsweise die Anisotropie, etc., durchführen zu können. Da laut obiger Definition ein Kristallgitter eine repetitive Struktur aus Elementarzellen darstellt, ist es zweckmäßig, die Geometrie dieser Basisobjekte zu quantifizieren. Im Allgemeinen kann eine Elementarzelle im dreidimensionalen euklidischen Raum entweder durch drei Gitter- bzw. Basisvektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ($= \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} = a_i, b_i, c_i$), oder aber mit den entsprechenden Gitterkonstanten a, b, c sowie den zugehörigen Gitterwinkeln α, β, γ eindeutig festgelegt werden. Es sei an dieser Stelle jedoch festgehalten, dass durch die Festlegung einer Einheitszelle der eigentliche Kristall in seiner gesamtheitlichen Struktur noch nicht eindeutig determiniert ist. Die Umkehrung dieser offensichtlichen Tatsache bedeutet, dass es für ein gegebenes Kristallgitter nicht nur eine, sondern unendlich viele Möglichkeiten gibt, eine Elementarzelle zu definieren. Verwendet man jedoch allgemeine Elementarzellendefinitionen wie bspw. kleinstes Zellvolumen (primitive Elementarzelldefinition) bzw. kürzester Nachbarschaftsabstand (Wigner-Seitz-Elementarzelldefinition), sind eventuell vorhandene Symmetrieeigenschaften der Kristallstruktur meist nur schwer erkennbar, weshalb man zusätzliche Bedingungen an die Definition der Elementarzelle festlegt. Durch diese zusätzlichen Bedingungen resultieren zwar geometrisch-räumlich größere Objekte (Elementarzellen), jedoch sind die Symmetrieeigenschaften des gesamten Kristallsystems in der so definierten Elementarzelle besser erkennbar. Im Wesentlichen umfassen die zusätzlichen Bedingungen zur Elementarzelldefinition, dass gegenüberliegende Flächen parallel sind, die Zelle möglichst klein sein, aber dennoch die volle Symmetrie des Gitters darstellen soll, die Koordinatenachsen sich nach Möglichkeit unter einem Winkel von 90° oder 120° schneiden sollen sowie ein Rechtssystem bilden müssen. Es zeigt sich, dass es für diese Bedingungen sieben verschiedene Achsensysteme – die sogenannten Kristallsysteme – gibt, womit unmittelbar die Basisvektoren determiniert werden. Aus den Möglichkeiten bezüglich der Anordnung von Elementarzellen ein gesamtes Kristallgitter zu generieren, erhält man zusammen mit den eben erwähnten und eingeführten Achssystemen die oft verwendeten Bravais-Gitter, von denen es nach Einhaltung sämtlicher bisher eingeführten Vorschriften exakt 14 gibt. Es sei an dieser Stelle nochmals erwähnt, dass diese Gitter aus einer im Wesentlichen willkürlichen, jedoch zweckmäßigen Definition folgen und durch jede andere Vorschrift ersetzbar wären, wobei allerdings in den Materialwissenschaften sowie in der Festkörperphysik die Verwendung sogenannter Bravais-Gitter meist üblich ist.

Achsen	Symmetrien (Achsen- bzw. Kristall- system)	Primitiv	Basiszentriert	Raumzentriert	Flächenzentriert
Orthogonal	Kubisch: $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
	Tetragonal: $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
	(Ortho-)Rhombisch: $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$				
Schief- winklig	Hexagonal: $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2} = \frac{3}{4}\gamma$				

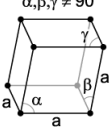
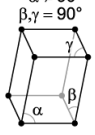
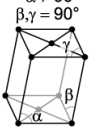
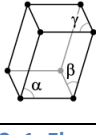
Trigonal: $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \frac{\pi}{2} \neq \gamma$				
Monoklin: $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$				
Triklin: $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$				

Tabelle 2–1: Elementarzellen bzw. Bravais-Gitter

Es gibt allerdings auch Problemklassen in der Festkörperphysik, den Materialwissenschaften oder der Kristallographie, bei denen andere Elementarzelldefinitionen als die hier erwähnten Bravais-Gitter effizienter und zweckmäßiger sind.

Festkörper ohne innere strukturierte (Fern-)Ordnung wie beispielsweise Glas werden amorph genannt. Daneben gibt es noch Quasikristalle, die zwar wohlgeordnet sind, jedoch keine dreidimensionale Translationssymmetrie besitzen und aus mehreren unterschiedlichen Struktureinheiten aufgebaut sein können.

Je nach Ausprägung der äußeren Form unterscheidet man Kristalle, deren äußere Form durch fremde Grenzflächen bestimmt ist und die als xenomorphe Kristalle oder Kristallite bezeichnet werden sowie unbeeinträchtigt ausgebildete, sogenannte idiomorphe Kristalle (mit Eigengestalt). Diese erwähnten Kristallite findet man in allen technischen metallischen Werkstoffen als Kornstrukturen wieder, wobei der Terminus „Korn“ bzw. „Kornstruktur“ aus dem Kontext der Materialwissenschaften kommt und dort auch hauptsächlich als synonyme Begriff für einen Kristalliten verwendet wird. Somit sind Kristallite (bzw. Körner) im wesentlichen Kristalle, die die eigentliche Kristallform nicht oder nur teilweise abzeichnen. Am Rande sei darauf verwiesen, dass man anisotrope Flüssigkeiten, welche einige Charakteristika eines Kristalls aufweisen, oft als Flüssigkristalle bezeichnet.

Ein weiterer wichtiger Punkt bei der Beschreibung von Kristallen ist die Festlegung von Richtungen innerhalb der Kristallstruktur. Die Richtung kann am einfachsten mittels Vektoren beschrieben werden. Da sich Vektoren stets auf Basissysteme beziehen, wobei diese Basisvektoren ohnehin schon in der Elementarzelldefinition innerhalb einer Kristallstruktur festgelegt sind, ist die Richtungs determination mittels eines Zahlentriplett im dreidimensionalen euklidischen Raum eindeutig und einfach definierbar. Aus dieser Überlegung heraus ist eine einfache Verbindung zu den sogenannten Millerschen Indizes gegeben, die in der Kristallographie genau zum Zwecke der Richtungs determination innerhalb von Kristallsystemen üblich ist und in anderen Disziplinen wie der Festkörperphysik (Röntgenbeugung, Bragg Beziehung, etc. ...), den Materialwissenschaften (bspw. Kristallmorphologie) oft angewendet werden. Da Ebenen ebenfalls durch Richtungen wie beispielsweise Normalvektoren festlegbar sind, ist es auch möglich diese geometrischen Objekte (Gitterebenen, Gleitebenen, etc....) durch Millersche Indizes zu beschreiben. Es gibt verschiedene Ausgangspunkte, Millerindizes einzuführen, wobei der hier gewählte Weg zwar nicht am elegantesten ist, jedoch den Vorteil hat, dass dieser sich am anschaulichsten darstellen lässt. Ausgehend von einem ausgezeichneten Anfangspunkt, der den Ursprung des Basissystems darstellt, können nach obiger Elementarzelldefinition drei Nachbarnpunkte der Basiszelle festgelegt werden, wobei die drei Verbindungsvektoren vom Ursprung zu diesen Nachbarnschaftseckpunkten die Basisvektoren darstellen. Die Millerschen Indizes sind durch die Anzahl der diskreten Sprünge von einem Gitterpunkt zum Nächsten in Richtung der drei Basisvektoren (Achssysteme) der Elementarzelle definiert, womit diese Größen ganze Zahlen darstellen. Diese drei Indizes h , k und l bilden ein Zahlen-triplett, welche man als Millersche Indizes bezeichnet. Negative Indizes werden mit einem über die Zahl geschriebenen Balken gekennzeichnet, also beispielsweise \bar{k} für $-k$. Die Notation des Triplett in eckigen Klammern bezeichnet eine spezielle Richtung die auch als Richtungsvektor interpretierbar ist, also beispielsweise $[h\ k\ l]$.

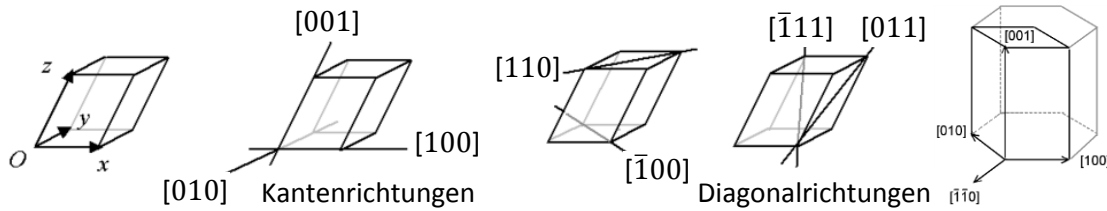


Bild 2-5: Richtungsfestlegung mit Miller Indizes in trikliner (l) und hexagonaler (r) Elementarzelle eines Kristallgitters

Die Notation in spitzen Klammern, also die exemplarische Menge $\langle u \ v \ w \rangle$, bezeichnet alle zum Vektor $[u \ v \ w]$ kristallographisch äquivalenten Richtungen. Dies soll am Beispiel $\langle 1 \ 0 \ 0 \rangle$ verdeutlicht werden, aus dem die Richtungen $[1 \ 0 \ 0]$, $[\bar{1} \ 0 \ 0]$, $[0 \ 1 \ 0]$, $[0 \ \bar{1} \ 0]$, $[0 \ 0 \ 1]$ sowie $[0 \ 0 \ \bar{1}]$ resultieren, woraus sich wiederum erkennen lässt, dass kristallographisch äquivalente Richtungen prinzipiell durch Permutation der Millerschen Indizes bzw. deren Vorzeichen ermittelbar sind.

Die Notation eines Triplets in runden Klammern bezeichnet eine spezifische Ebene, also beispielsweise $(h \ k \ l)$. Die reziproken reellen Werte der ganzzahligen Millerschen Indizes – also die Größen $\frac{1}{h}$, $\frac{1}{k}$ und $\frac{1}{l}$ – beschreiben die Schnittpunkte der festgelegten Ebene an den entsprechenden Koordinatenachsen, welche wiederum durch die Basisvektoren der Elementarzelle festgelegt sind. Eine Division durch einen der Zahl Null äquivalenten Millerschen Index bedeutet, dass der Schnittpunkt im Unendlichen liegt, was wiederum die Parallelität der Ebene mit der entsprechenden Koordinatenachse bzw. des zugehörigen Basisvektors nach sich zieht. Aus der Tensoralgebra ist bekannt, dass zu jedem beliebigen Basissystem ein zugeordnetes reziprokes Basissystem definiert werden kann (Lippmann, 1996), das ebenso zur gleichwertigen Beschreibung des Kristallsystem verwendbar ist. Im Kontext des reziproken Basissystems stellen die Millerschen Indizes dann jedoch die Komponenten des Normalvektors der zu determinierenden Ebene im Kristall dar. Im kubischen Basissystem fällt aufgrund der Tatsache, dass es sich um ein orthonormales (kartesisches) Basissystem handelt, das Ausgangsachsensystem mit dem reziproken Basissystem zusammen. Auch bei der Festlegung von Ebenen, die kristallographisch zueinander äquivalent sind, gibt es eine eigene Notation. So kann mit der Schreibweise $\{h \ k \ l\}$ die Menge all jener Ebenen festgelegt werden, die zur Ebene $(h \ k \ l)$ kristallographisch äquivalent sind, wobei für die prinzipielle Bestimmung der Menge dieser Ebenen formal die gleiche Vorgehensweise herangezogen werden kann, wie diese bei der Festlegung kristallographisch äquivalenter Richtungen vorgestellt wurde, was auf die Permutation von Millerschen Indizes und deren Vorzeichen hinausläuft.

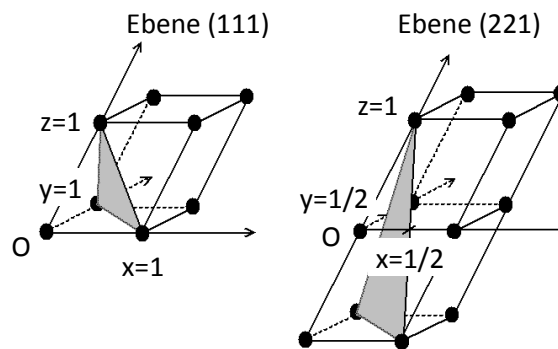


Bild 2-6: Festlegung von Ebenen durch Millersche Indizes und deren Inversion im triklinen Kristallsystem

Abschließend wird noch auf die Bedeutung von dichtesten Kugelpackungen bzw. Packungsdichten in Kristallen eingegangen. Die Packungsdichte ist in der Kristallographie definiert als Verhältnis des Volumens der Atome, die sich in einer Elementarzelle befinden, zum Gesamtvolumen der Elementarzelle. Die Atome werden dabei als Kugeln identischer Größe angenommen. Man kann diese Definition auch allgemeiner auffassen, wenn nämlich im zweidimensionalen Fall die Kugel als Kreis und das zugeordnete dreidimensionale Volumen der Elementarzelle als Fläche der entsprechenden Kristallebene angenommen wird. Daraus resultieren dann dichteste Packungen bezüglich betrachteter Kristallsystemebenen.

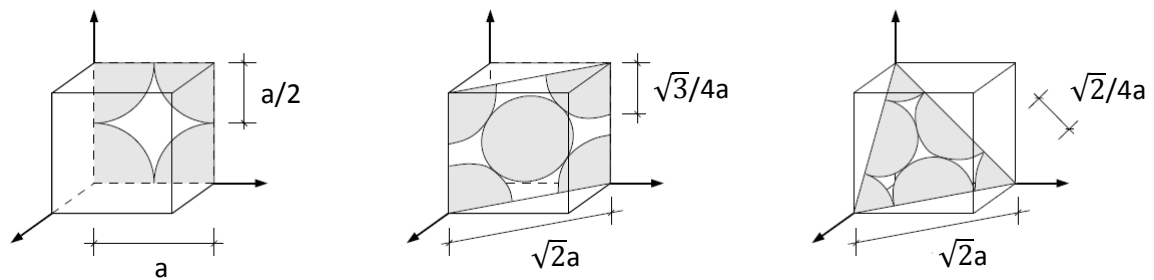


Bild 2-7: Packungsdichten in Gitterebenen beim kubischen Kristallsystem

Diese Packungsdichten spielen eine entscheidende Rolle bei der plastischen Deformation von Metallen, die sich im Wesentlichen durch Vorgänge im Kristallgitter des (metallischen) Materials erklären lassen. Unter Verwendung von Packungsdichten kann nämlich erklärt werden, weshalb plastische Deformationen hauptsächlich auf bestimmte Gleitebenen ablaufen und warum sich innerhalb dieser Gleitebenen bestimmten Gleitrichtungen bevorzugt ausbilden. Um darauf genauer eingehen zu können, muss jedoch die Begrifflichkeit des Gleitens genauer definiert werden, was Inhalt des nachfolgenden Abschnitts ist.

2.2.2 Defekte in Kristallen

Im Gegensatz zu einem idealisierten Kristall bzw. Kristallsystem, welches im vorigen Abschnitt genauer beschrieben wurde, weisen reale Materialien keine perfekte kristalline Mikrostruktur auf. Die Abweichungen von der idealen Kristallstruktur bzw. die Störung dieses Aufbaus bezüglich bestimmter Eigenschaften wie beispielsweise elektrisch, chemisch oder strukturell, kann im Allgemeinen als Defekt eines Kristalls definiert werden. Da hier nur mikroskopische Modelle Verwendung finden, welche auf den räumlich-strukturellen Aufbau des metallischen Materials Bezug nehmen, werden nur Defekte bezüglich der Morphologie des Werkstoffs beschrieben sowie in der Formulierung berücksichtigt. Wie bereits erwähnt gibt es allerdings noch Defekte, die auf Störungen anderer Eigenschaften des Kristallsystems Bezug nehmen. Im Wesentlichen kann dabei in folgende drei Kategorien differenziert werden:

- Elektrische Defekte: Darunter versteht man im Allgemeinen beim vorliegenden realen Kristall lokale Abweichungen der Ladungsverteilung gegenüber dem idealisierten Zustand. Wichtige Materialien, in deren Kristallstruktur die Ladungsverteilung gestört ist, sind die Piezokeramiken, die ein breites technisches Anwendungsgebiet haben.
- Chemische Defekte: Die Ursache dieser Art von Defekten ist in der Substitution bzw. Einlagerung von Fremdatomen gegeben, deren Ursprung unter anderem durch Ausscheidungsprozesse determiniert sein kann. Sehr wichtige Vertreter dieser Art von Defekten sind sogenannte interstitielle Zwischengitteratome, die auf Plätzen sitzen, die im regulären Gitter unbesetzt sind. Solche Defekte werden auch als interstitielle Fehlstellen bezeichnet.
- Strukturelle Defekte: Defekte dieses Typs liegen dann vor, wenn die räumliche Fortsetzung der Einheitszelle bzw. diese selbst in der Morphologie oder dem geometrischen Aufbau bezüglich der idealen Struktur gestört ist.

Im Allgemeinen liegt fast immer eine Kombination aus den hier dargestellten Arten von Defekten vor, wobei sicherlich strukturelle Defekte die wichtigsten Fehlerarten darstellen und die anderen beiden Defekttypen – nämlich elektrische sowie chemische – lediglich als eine Folge von Abweichungen in der Morphologie von der Idealstruktur angesehen werden können. Aus diesem Grund werden strukturelle Defekte im Folgenden weiter klassifiziert bzw. genauer beschrieben, da diese auch eine zentrale Rolle innerhalb plastischer Deformationsprozesse spielen. Grundsätzlich können strukturelle Defekte in Punkt- (0-dimensional), Linien- (1-dimensional), Flächen- (2-dimensional) sowie Volumendefekte (3-dimensional) eingeteilt werden. Einige Defekte sind in Bild 2-8 dargestellt und sollen im Folgenden beschrieben werden.

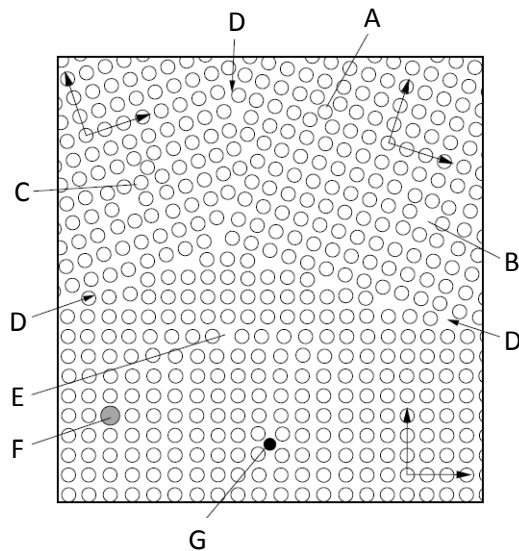


Bild 2-8: Zweidimensionaler Schnitt durch dreidimensionale Kristallstruktur mit exemplarischen Defekten

- A. Interstitielles Atom (Punktdefekt): Eingelagertes zusätzliches Atom auf einer an sich irregulären Stelle in der Kristallstruktur, wobei der Einlagerungsplatz (Zwischengitterplatz) bezüglich einer anderen ähnlichen Elementarzellenstruktur durchaus regulär wäre. Wichtig bei diesem Punktdefekt ist, dass das zusätzlich eingelagerte Atom ein chemisches Element repräsentiert, aus dem die ideale Kristallstruktur besteht.
- B. Leerstelle (Punktdefekt): Dabei handelt es sich um freie Gitterplätze, die im regulären idealen Gitter normalerweise besetzt wären, bei Leerstellen jedoch unbesetzt bleiben.
- C. Frenkel-Paar (Punktdefekt): Ein Frenkel-Defekt bzw. Frenkel-Paar entsteht dadurch, dass ein Ion oder Atom seinen regulären Gitterplatz verlässt und auf eine normalerweise nicht besetzte Position im Kristallgitter wandert. Dadurch entsteht jeweils eine Leerstelle und ein Zwischengitteratom (bzw. ein Zwischengitterion). Zwischen dem Zwischengitteratom und der Leerstelle besteht eine anziehende Wechselwirkung, was zu elektrischen Defekten führt.
- D. Korngrenze (Flächendefekt): Korngrenzen trennen zwei Körner eines Kristalls (Kristallite), das heißt zwei Bereiche mit unterschiedlicher räumlicher Orientierung des Gitters.
- E. Versetzung (Linienfunkt): Diese Art von Fehlern resultiert aus Inkonsistenzen bezüglich der geometrisch-räumlichen Eigenschaften bzw. der Anordnung von Gitterebenen untereinander. Diese Fehler können in der Kristallstruktur durch eindimensionale linienbezogene Objekte geometrisch dargestellt werden. Dabei unterscheidet man zwischen Stufen- und Schraubenversetzungen.
- F. Substitutionsatom (Punktdefekt): Substitution eines regulären Platzes in der Kristallstruktur durch ein verunreinigendes Fremdatom.
- G. Zwischengitteratom (Punktdefekt): Eingelagertes zusätzliches verunreinigendes Atom auf einer an sich irregulären Stelle in der Kristallstruktur, wobei der Einlagerungsplatz (Zwischengitterplatz) bezüglich einer anderen ähnlichen Elementarzellenstruktur durchaus regulär wäre. Solche Defekte können auch als interstitielles verunreinigendes Fremdatom aufgefasst werden. Der Unterschied zum Punktdefekt, der als interstitielles Atom bezeichnet wird, liegt darin, dass das zusätzliche Atom ein komplett anderes chemisches Element darstellt als jene, aus welchen die ideale reguläre Kristallstruktur an sich aufgebaut ist.

Wie bereits erwähnt, können die strukturellen Kristalldefekte nach ihrer räumlichen Dimension eingeteilt werden, wobei im Folgenden diese Defektdifferenzierung genauer beschrieben wird.

- Punktdefekte: Diese Defekte können entweder intrinsisch verursachte 0-dimensionale Fehler wie Leerstellen sowie interstitielle Atome oder aber eine Kombination aus beiden, welche dann als sogenanntes Frenkel-Paar bezeichnet wird, darstellen. Andernfalls besteht die Möglichkeit, dass 0-dimensionale Defekte extern verursacht sind, wobei dann jene die ideale Kristallstruktur

verunreinigenden Fremdpartikel in Form von Substitutions- oder aber auch Zwischengitteratome vorkommen können.

- **Liniendefekte:** Diese Art von Defekt spielt bei der plastischen Deformation von Metallen eine zentrale Rolle. Versetzungen entstehen beim Kristallwachstum aus der Schmelze oder bei der Rekristallisation im festen Zustand infolge von Eigenspannungen oder bei der plastischen Verformung und werden durch Versetzungslinien dargestellt. Ganz allgemein kann man Versetzungen über Störungen innerhalb des Aufbaus eines perfekten Kristalls entlang von Linien definieren. Geometrisch werden Versetzungen entweder durch das Fehlen einer Halbebene (Stufenversetzung) bezüglich des perfekten Kristallaufbaus gebildet oder aber dadurch, dass ein Teil des dreidimensionalen Gitters in entgegengesetzten Richtungen und an beiden Seiten durch eine zweidimensionale Fläche ersetzt wird (Schraubenversetzung). Für diese eindimensionalen Kristallaufbaufehler gilt, dass sie wegen thermodynamischer Gründe nicht komplett aus dem vorliegenden Kristall entfernt werden können.
- **Flächendefekte:** Der wichtigste Flächendefekt stellt die sogenannte Korngrenze dar, welche sich meist während der Kristallisation ausbildet. Wie bereits erwähnt, stellt ein Korn bzw. Kristallit im Wesentlichen einen Einkristall mit willkürlicher Orientierung dar, wobei die Orientierung (siehe Koordinatensystem in Bild 2-8) die räumlich-geometrische Ausrichtung des Gitters in Form einer vektoriellen Größe quantitativ beschreibt. Abhängig von dem Winkel, um den zwei benachbarte Gitter gegeneinander verdreht sind, spricht man entweder von Kleinwinkelkorngrenzen (Subkorngrenzen) oder aber von Großwinkelkorngrenzen. Liegen Kleinwinkelkorngrenzen vor, so kann man sich diese Grenze auch aus einem Feld von Versetzungen aufgebaut vorstellen. Bei Großwinkelkorngrenzen ist die atomistisch diskrete Struktur dieses flächigen Defekts wesentlich komplexer und variiert stark mit dem Winkel, der zwischen den beiden benachbarten Kornorientierungen vorliegt. Während der Kristallisation von verunreinigten metallischen Materialien können noch weitere Arten von flächenbezogenen Defekten entstehen. Ein wichtiger Defekttyp bei Metallen sind sogenannte Stapelfehler, welche oft in Verbindung mit prismatischen Versetzungsschleifen (reinen Stufenversetzungslinien) oder partiellen Versetzungen auftreten. Als letzter wesentlicher Vertreter von 2-dimensionalen flächigen Defekten sei noch die Zwillingsgrenze erwähnt, welche die Grenzfläche zwischen den beiden Teilen eines Kristallzwillings darstellt. Ein Kristallzwilling besteht aus zwei miteinander verwachsenen Kristallen der gleichen Struktur und Zusammensetzung. Die beiden Einzelkristalle lassen sich entweder durch Punktspiegelung (Inversion), durch Spiegelung an einer Ebene, der sogenannten Zwillingssebene, oder durch eine 180-Grad-Drehung um eine Achse, die dann Zwillingsachse genannt wird, zur Deckung bringen.
- **Volumendefekte:** Dieser Art von Defekt stellt einen dreidimensionalen Volumenfehler (auch Inklusionen) dar, der als vollständige Fremdphase im Inneren des Kristalls vorliegt. Dabei kann zwischen Poren (Objekte bzw. offene oder geschlossene Hohlräume im Kristall, die mit Gas oder Flüssigkeit gefüllt sind), Einschlüsse (feste Fremdphasen) sowie Ausscheidungen (hier wird die Fremdphase selbst aus den Substanzen des umgebenden Kristalls durch chemische Reaktionen sowie Phasenumwandlungen gebildet) unterschieden werden. Da Volumenfehler den umgebenden Kristall verzerren, sind diese dreidimensionalen Defekte von einer Zone mit einer höheren Konzentration niederdimensionaler Gitterfehler umgeben.

Nach diesen Ausführungen wird nun speziell auf den eindimensionalen Gitterfehler, nämlich die Versetzung, eingegangen, welche die zentrale Rolle bei plastischen Deformationen innerhalb des in dieser Arbeit verwendeten konstitutiven Materialmodells spielt.

2.2.2.1 Versetzungen

Grundsätzlich stellt sich die Frage, warum metallische Werkstoffe, deren intrinsische Struktur kristallin aufgebaut ist, bestimmte Festigkeitseigenschaften bzw. ein sehr spezifisches Deformationsverhalten aufweisen. Dafür wurden im Laufe der Zeit Modelle entwickelt, die Defekte innerhalb der Kristallstruktur verwenden. Dabei hat sich beispielsweise gezeigt, dass die Bewegung von Versetzungen innerhalb der Kristallstruktur sehr viele Deformationseigenschaften von metallischen Materialien erklärt. So wird beispielsweise die Belastung, welche notwendig ist, um ein Metall plastisch, zu deformieren, durch jene Spannung determiniert, welche notwendig ist, um eine Versetzungsbewegung auf kristallinem Niveau zu bewirken. Diese Tatsache führt wiederum auf die stark repetitive innere Mikrostruktur des Kristalls zurück, welche größere bleibende Deformationen des Materials zulässt. Um die These für die Notwen-

digkeit von vorliegenden inneren Defekten im Kristall zu untermauern, wird ein Modell verwendet, das von einer vollkommen idealen Gitteranordnung ausgeht. Dazu kann in einem ersten Ansatz der Kristalllaufbau durch ein Federmodell näherungsweise dargestellt werden, wobei die Gitterpunkte (Atome) jeweils mit den in unmittelbarer Nachbarschaft befindlichen Elementen (Atome) durch Federn miteinander verbunden sind. Nun werden durch eine hinreichend große äußere Spannung bleibende plastische Verformung innerhalb des Werkstoffs induziert, wobei dieser Prozess durch ein Abgleiten von aufeinanderliegenden Atomlagen beschrieben wird, um so Abschätzungen für die notwendigen makroskopisch-plastischen Deformationsspannungen, welche im Folgenden auch als Fließspannungen bezeichnet werden, zu ermitteln.

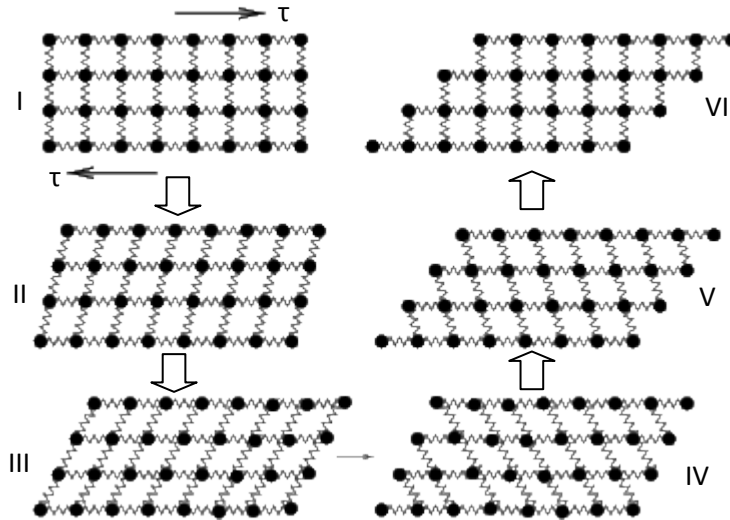


Bild 2-9: Federmodell zur theoretischen Scherfestigkeit

Das eben beschriebene und in Bild 2-9 dargestellte Federmodell für die plastische Verformung zeigt in den ersten drei Schritten (Nummern I bis III), dass die Federn gedehnt werden, der vierte entspricht dem dritten mit geänderter Nachbarschaft, danach ziehen sich die Federn wieder zusammen. Der idealisierte vierte Schritt stellt in diesem Beschreibungsversuch den Kern dieses Ansatzes dar, weil dabei ein diskreter Sprung der Ebenen relativ zueinander erfolgt, der wiederum die Änderung von Nachbarschaften der Gitterpunkte nach sich zieht. Zur Berechnung der idealen theoretischen Scherspannung verwendet man im einfachsten Ansatz das lineare Hookesche Gesetz

$$\tau = G\gamma = G \frac{x}{d} \quad (\text{Rel. 2-59})$$

mit τ als Scherspannung, G als Schubmodul, d als Ebenenabstand und x als Atomverschiebung sowie die Linearisierung einer sinusförmig angenommenen Scherspannung bezüglich der Verschiebung von Gitterebenen

$$\tau = T \sin \frac{2\pi x}{a} \cong T \frac{2\pi x}{a} \quad \forall \quad \frac{2\pi x}{a} \ll 1 \quad (\text{Rel. 2-60})$$

mit a als Gitterkonstante und T als nicht bekannte Amplitudenschubspannung. Durch Umformung ist für die Atomverschiebung x sowie der Gitterkonstante a folgende Ungleichungsrelation ersichtlich

$$x \ll a \quad (\text{Rel. 2-61})$$

was wiederum für die Abschätzung der plastischen Scherspannung nach sich zieht, dass diese eine obere Schranke darstellt, da für kleine Auslenkungen der Materialtangente Modul aufgrund der Sinusfunktion seine maximale Steigung aufweist.

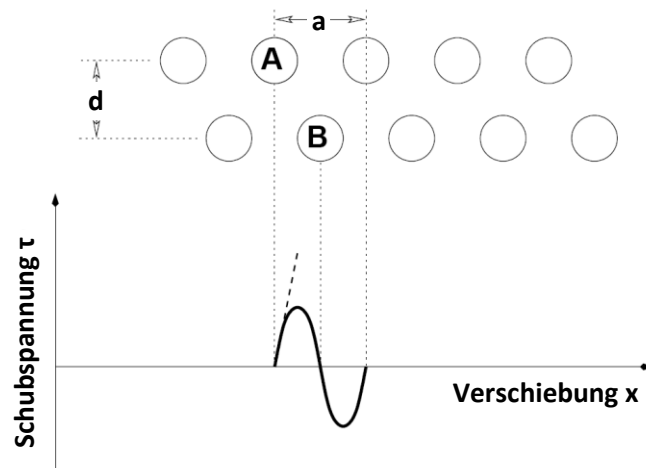


Bild 2-10: Verschiebungsspannungen für Gitterpunktanordnungen der Kristallebenen zur theoretischen Scherfestigkeit

Aus der schematischen Darstellung im Bild 2-10 und den bisherigen Ausführungen geht hervor, dass das Atom A bei einem größeren Versatz irgendwann über dem Atom B liegt. Der Versatz beträgt dann die Hälfte der Gitterkonstanten, was einem instabilen Gleichgewicht entspricht und eine verschwindende Schubspannung zur Folge hätte. Dieses Szenario wiederholt sich mit der Periode des Gitters und demzufolge kann die Schubspannung auch sinusförmig dargestellt werden.

Somit kann die Amplitudenschubspannung T aus dem linearen Anteil der Taylorreihenentwicklung der Sinusfunktion

$$\tau = T \frac{2\pi x}{a} = G \frac{x}{d} \Rightarrow T = G \frac{a}{2\pi d} \quad (\text{Rel. 2-62})$$

sowie die obere Schranke der theoretischen Scherfestigkeit τ durch die Annahme einer Äquivalenzapproximation aus Gitterkonstanten a bzw. Ebenenabstand d ($a \approx d$) und der Tatsache, dass der Sinus einen maximalen Wert von 1 besitzt, abgeschätzt werden.

$$\tau = G \frac{a}{2\pi d} \sin \frac{2\pi x}{a} \Rightarrow \tau \approx \frac{G}{2\pi} \approx \frac{G}{6} \quad (\text{Rel. 2-63})$$

Aus verschiedenen experimentellen Bestimmungen der Fließspannung zeigt sich aber, dass je nach Art des metallischen Werkstoffs die theoretischen Scherfestigkeiten ca. 10^2 bis 10^4 mal größer sind als die gemessenen plastischen Spannungen. Selbst eine Verfeinerung dieses Modells zur Abschätzung der oberen Schranke der Fließspannung reduziert diese Abweichungen nur unwesentlich. Dieser scheinbare Widerspruch konnte erst in den 1930er Jahren mit der Einführung des Konzeptes der Versetzung (Orowan, 1934) (Polanyi, 1934) geklärt werden. Die Grundidee ist, dass sich nicht der ganze Kristall homogen verformt, sondern dass eine lokale, stark verzerrte Region den Kristall durchläuft. Diese lokal stark verzerrte Region stellt den bereits zuvor eingeführten eindimensionalen Defekt der Versetzung dar, welcher sich bei plastischen Deformationen durch die Mikrostruktur des Werkstoffs bewegt. Man kann dieses Konzept der eindimensionalen Kristallstrukturdefekte auch aus energetischen Überlegungen heraus ableiten, da für die Bewegung der Versetzung deutlich weniger Arbeit erforderlich ist als für die simultane Verschiebung der gesamten Ebenen gegeneinander. Dies ist analog zur Bewegung eines Teppichs: es ist viel leichter, ihn zu verschieben, wenn man eine Falte hineinbringt und diese durchschiebt, als ihn als Ganzes über den Boden zu ziehen (siehe Bild 2-11).



Bild 2-11: Analogie zur Versetzungsbewegung durch Verschieben eines Teppichs

Geht man von diesen Beschreibungsansätzen aus, können inelastische Deformationen bzw. Abgleitvorgänge ganzer Kristallebenen durch Versetzungsbewegungen beschrieben werden, was im einfachsten Fall, durch Bewegung sogenannter Stufenversetzungen in der Kristallstruktur mit Bild 2-12 anschaulich ist.

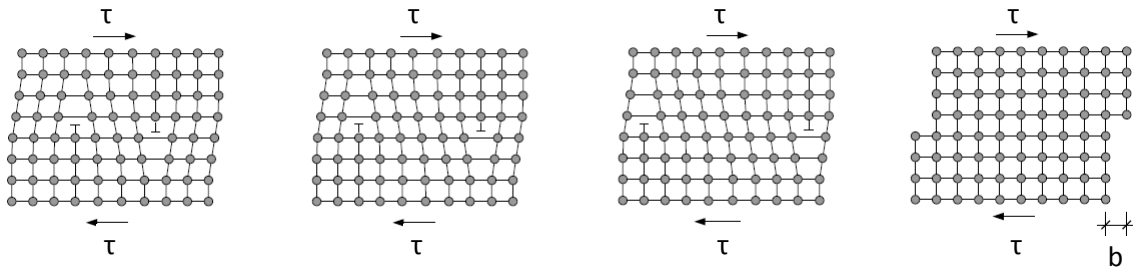


Bild 2-12: Bewegung zweier Stufenversetzungen durch äußere Schubspannungen

Durch den Vorgang der Stufenversetzungsbewegung kann der völlig identische Endzustand erreicht werden wie beim theoretischen Schubfestigkeitsmodell, jedoch auf energetisch effizienterer Weise. Somit bleibt als nächster wesentlicher Schritt, Versetzungen weiter zu differenzieren. Meist wird nur zwischen den zwei bereits erwähnten Versetzungstypen unterschieden, welche im nachfolgend angeführt sind.

- Stufenversetzung
- Schraubenversetzung

Bei diesen beiden Versetzungstypen handelt es sich um Extremfälle, die jedoch geometrisch gut darstellbar sind. Ein anderer Zugang zur Einteilung von Versetzungen in Stufen- bzw. Schraubencharakteristik ist mit der Tatsache verbunden, dass die Gleitebene nicht als Ganzes, sondern über Bewegungen dieser Versetzung durch den Kristall gegeben ist, was wiederum ein Abscheren von einzelnen Gitter- bzw. Atomreihen nacheinander darstellt (siehe Bild 2-12). Unmittelbar damit verknüpft ist, dass man von einem ungestörten Ausgangs- zu einem Endzustand, dessen Gestalt derart ist, dass ein Teil um eine atomare Stufe (Gitterlänge) abgeschert ist, auf zwei unterschiedlichen Wegen gelangen kann, was in Bild 2-13 schematisch dargestellt ist. Hierbei wird angenommen, dass eine ganze Reihe von Gitterpunkten (Atomen) verschoben werden kann, aber nicht die ganze Ebene simultan. Theoretisch kann man also eine Reihe abscheren, die in Richtung der angelegten äußeren Schubspannung liegt oder eine, die senkrecht dazu liegt. Im Fall der Abscherung bzw. Bewegung einer Reihe senkrecht zur Kraft wird von einer Stufenversetzung gesprochen, im anderen Fall der Abscherung bzw. Bewegung der Reihe parallel zur anliegenden Kraft von einer Schraubenversetzung. Die zuletzt genannte Begriffsbildung wird sofort erklärbar, wenn man sich die atomare Anordnung an der Grenze von ursprünglicher Ausgangsgitterstruktur zu der bereits deformierten bzw. abgesicherten Endgitterstruktur etwas genauer ansieht (vgl. Bild 2-13 Detailabbildung). Darin ist der Beginn des Gleitens an der Stirnfläche zu erkennen, der sich Schritt für Schritt nach hinten durch den Kristall hindurchzieht. Verfolgt man einen beliebigen geschlossenen Weg auf der Oberfläche um die Versetzungslinie, die durch das grau markierte Gitterelement in Bild 2-13 markiert ist, so wechselt man bei einem kompletten Umlauf die Etage in der atomaren Struktur des Gitters. Bei Wiederholung dieses Verlaufs entsteht so eine Schraubenlinie als Trajektorie.

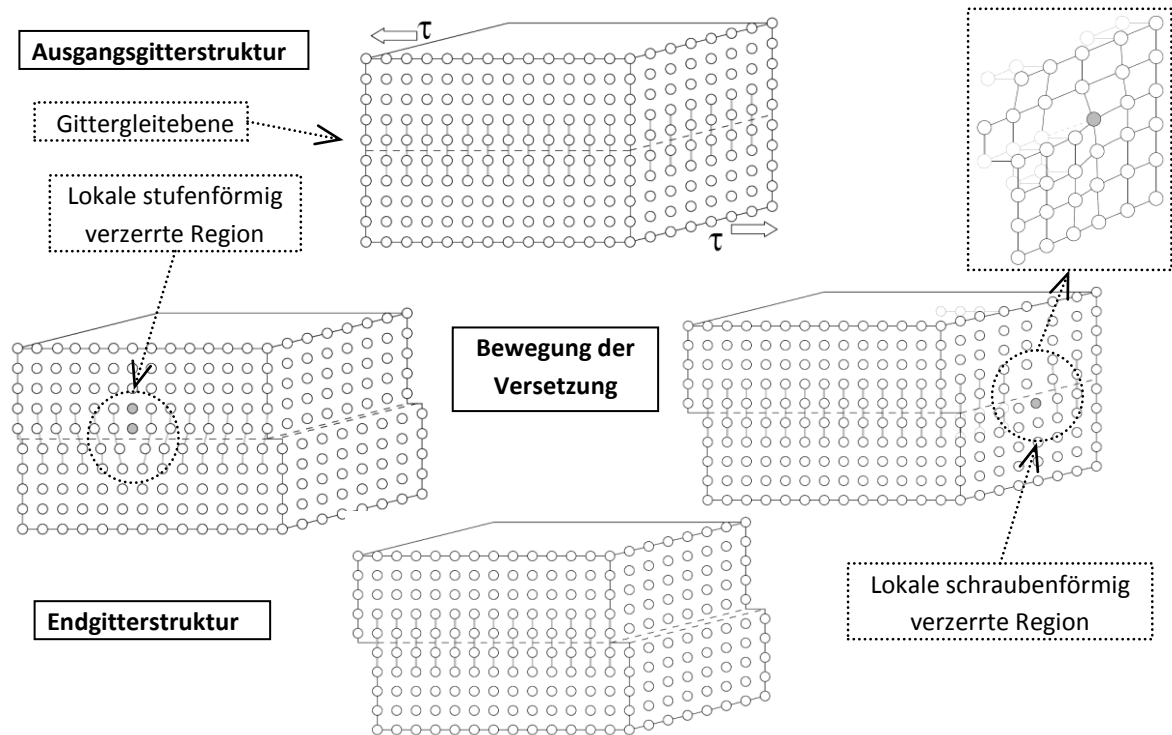


Bild 2-13: Möglichkeiten des Abgleitens einer Kristallebene aus Versetzungsbewegungen durch äußere Schubspannungen

Die Gestalt der Stufenversetzung ist leichter durch einen Blick in Richtung der Atomreihe, die bewegt wird, zu erkennen, da sich an diesem Ort der Störung eine zusätzliche Reihe von Gitterpunkten eingeschoben ist. Die Charakterisierung einer Versetzung erfolgt im Allgemeinen mit Hilfe zweier vektorieller Größen, nämlich mittels der bereits zuvor kurz erwähnten Versetzungslinie und durch den sogenannten Burgers-Vektor. Den Winkel, welchen diese beiden Größen zueinander einschließen, ist ein quantifizierendes Maß, welches die Versetzungseigenschaften determiniert. Da Stufen- bzw. Schraubenversetzung die beiden Extremfälle von Versetzungen darstellen, sind die Winkel, welche die Versetzungslinie bezüglich des Burgers-Vektors zueinander einschließen ebenfalls Extremwerte, was wiederum bedeutet, dass diese beiden Vektoren entweder senkrecht ($\pi/2$ bzw. $3\pi/2$) oder aber parallel (0 bzw. π) zueinander sind. Bei der Definition von Versetzungslinie bzw. Burgers-Vektor verwendet man zwecks besserer geometrischer Veranschaulichung am besten die reine Stufen- bzw. Schraubenversetzung. Zu Beginn ist es zweckmäßig, die Versetzungslinien der reinen Stufen- bzw. Schraubenversetzung zu definieren, was sich allerdings nur für diese speziellen Grenzfälle so einfach darstellt. Für beide Versetzungstypen ist die Richtung der Versetzungslinie unabhängig vom Ort bzw. Linienparameter und daher konstant. Die Versetzungslinie \vec{l} mit reinem Stufencharakter ist durch die Kante der zusätzlich eingefügten Gitterebene definiert, wohingegen die Versetzungslinie \vec{l} einer reinen Schraubenversetzung durch die Rotationsachse der zuvor weiter oben beschriebenen schraubenförmigen Trajektorie bezüglich des Abgleitvorgangs einer Kristallgitterebene definiert ist. Damit ein Burgers-Vektor \vec{b} überhaupt einföhrbar ist, muss zuerst der sogenannte Burgers-Umlauf definiert werden. Als sogenannter Burgers-Umlauf wird ein Linienzug um die Versetzungslinie bezeichnet, der in jeder kristallographischen Richtung gleich viele Schritte (in Atomabständen) enthält. In einem idealen Kristall wäre dieser Linienzug geschlossen, doch durch den Gitterbaufehler der Versetzung endet er nicht am Startpunkt, was in Bild 2-14 vereinfachend zweidimensional dargestellt ist.

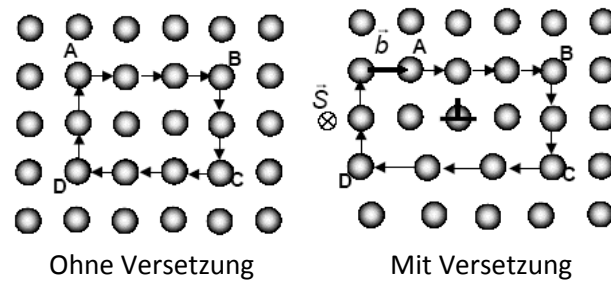


Bild 2-14: Burgers-Umlauf zur Bestimmung von Burgers-Vektor

Man muss einen zusätzlichen Schritt machen, um wiederum zum Ausgangspunkt zu gelangen. Der Vektor, der diesen zusätzlichen Schritt beschreibt, ist der Burgers-Vektor \vec{b} . Er ist von der genauen Größe und Form des Umlaufs unabhängig, so lange er die Versetzungslinie umschließt. Somit stellt der Burgers-Vektor eine Art Schließungsfehler dar, welcher die reale defektbehaftete zur idealen störungsfreien Kristallgitterstruktur in Relation setzt.

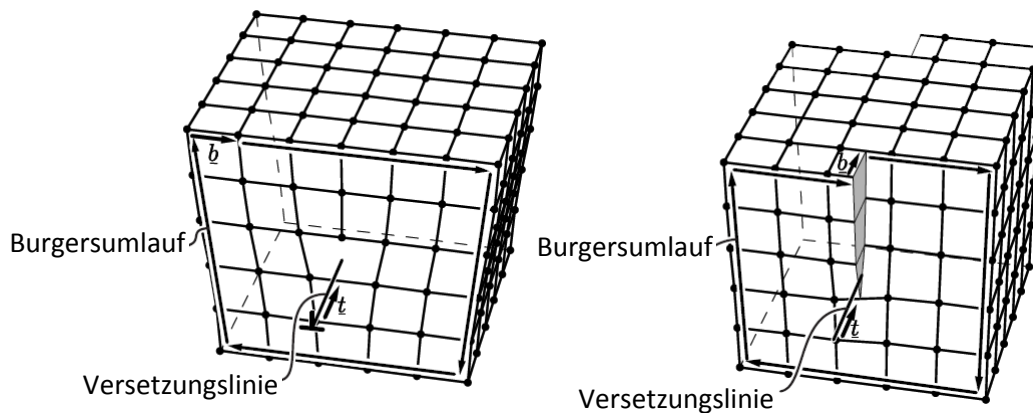


Bild 2-15: Burgers-Umlauf und Vektor für Stufen- und Schraubenversetzung

Die Drehrichtung des Burgers-Umlaufs ist bei dieser Definition nicht festgelegt, muss aber immer gleich gewählt werden. Es bietet sich an, sie nach der „Rechten-Hand-Regel“ passend zum Linienvektor \vec{t} zu wählen. Auch die Wahl der Orientierung des Linienvektors ist beliebig. Kehrt man sie um, so dreht sich entsprechend auch die Orientierung des Burgers-Vektors um. Damit kann die Definition der Stufenversetzung, bei der Orthogonalität mit $\vec{b} \perp \vec{t}$ vorliegt, bzw. Schraubenversetzung, für die Parallelität mit $\vec{b} \parallel \vec{t}$ gilt, abgeschlossen werden (siehe Bild 2-16).

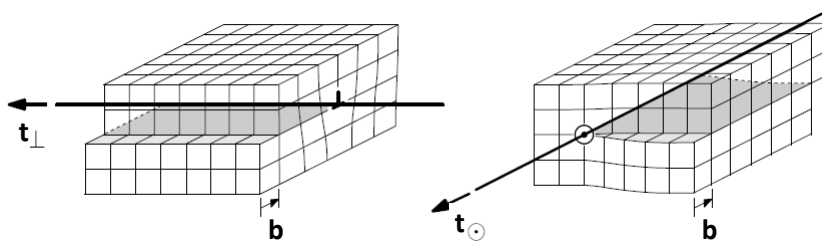


Bild 2-16: Charakterisierung der Richtungen von Stufen- und Schraubenversetzung

In der realen defektbehafteten Kristallstruktur liegen meist Mischformen dieser beiden Versetzungsarten vor, d.h. die Versetzungscharakteristik hat sowohl Eigenschaften einer Stufen- als auch einer Schraubenversetzung. Die Stärke der Ausprägung bezüglich Stufen- oder Schraubencharakter kann stark variieren und hängt von der betrachteten Position und somit vom Ort auf der Versetzungslinie ab, was durch den Punkt M in Bild 2-17 dargestellt ist. Die Versetzungslinie selbst wird durch eine einparametrische Kurve beschrieben, deren Tangentialvektor die Richtung der Versetzungslinie angibt. Die Richtung dieses Tangentenvektors ändert sich mit dem Kurvenparameter, wohingegen der Burgers-Vektor bezüglich dieser Versetzungslinie stets konstant und somit unabhängig vom Ort bzw. Kurvenparameter ist,

weshalb offensichtlich der Winkel zwischen Versetzungslinienvektor und Burgers-Vektor ebenfalls variiert.

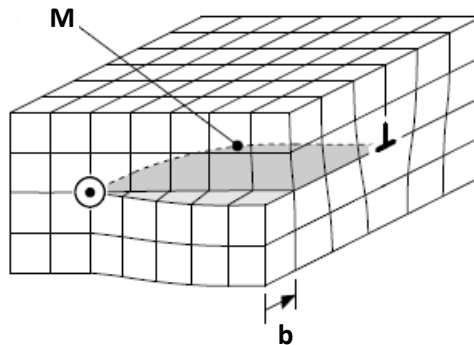


Bild 2-17: Charakter einer allgemeinen Versetzung im Punkt M

Abschließend sei noch der Begriff des Versetzungsknotens eingeführt, der einen Punkt darstellt, in welchem sich Versetzungslinien treffen (Bild 2-18). Diese Punkte sind im Allgemeinen kaum beweglich bzw. erfordern hohe Spannungen, um diese innerhalb der Kristallstruktur an eine neue Position zu bringen. Diese Eigenschaft besitzt im Erklärungsmodell zur Generierung von Versetzungen innerhalb spezieller Quellbereiche der Kristallgitterstruktur eine wichtige Rolle. Die Bildung eines Versetzungsknotens, d.h. das Zusammentreffen von Versetzungen, findet allerdings nur dann statt, wenn dies aus energetischen Gesichtspunkten zu einem niedrigen Niveau des so neu gebildeten Zustandes im System führt. Dies ist im Umkehrschluss der Grund, warum sich diese Versetzungsknoten so schwer aus deren räumlichen Positionen verschieben lassen, weil eine Änderung ihrer Lage einen energetisch ungünstigeren Zustand zur Folge hätte.

Im Folgenden seien einige Eigenschaften von Versetzungen zusammenfassend dargestellt:

- Versetzungen können nicht im Inneren eines perfekten Kristalls enden, sondern nur an ausgezeichneten Orten wie an der Kristalloberfläche selbst, an einer inneren Grenzfläche (Korn- oder Phasengrenze) oder aber an einem Versetzungsknoten.
- Versetzungen können im Inneren eines perfekten Kristalls aber auch in sich geschlossene Schleifen bilden.
- Der Burgers-Vektor \vec{b} ist für eine gegebene Versetzung überall konstant und unabhängig von der Wahl der Umlaufschleife, wohingegen sich der Linienvektor \vec{t} ändert, welcher die Richtung des eindimensionalen Kristalldefekts beschreibt.
- Die Gleitebene, auf welcher die plastische Deformation abläuft, wird durch den Burgers- und Linienvektor der Versetzung aufgespannt.
- Der Betrag des Burgers-Vektors \vec{b} ist ein Maß für die „Stärke“, d.h. die elastischen Verzerrungen um eine Versetzung.
- Unter Verwendung einer einheitlichen Vorzeichenkonvention bezüglich Burgers-Umlauf und Vektor verschwindet an einem Versetzungsknoten die Summe der Burgers-Vektoren.

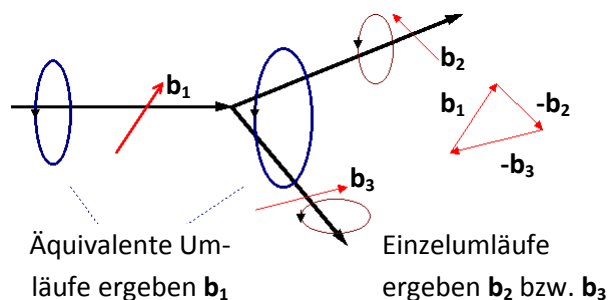


Bild 2-18: Eigenschaften von Burgers-Vektor in Versetzungsknoten

Aus letzter Aussage geht auch hervor, dass sich Versetzungen gegenseitig annihilieren können, was einer gegenseitigen Auslöschung durch entgegengesetzt orientierte Versetzungslinien entspricht (Bild 2-19), wobei dies in weiterer Folge einen nicht unwesentlichen Aspekt bei der Generierung von Versetzungen durch eine entsprechende Quelle darstellt.

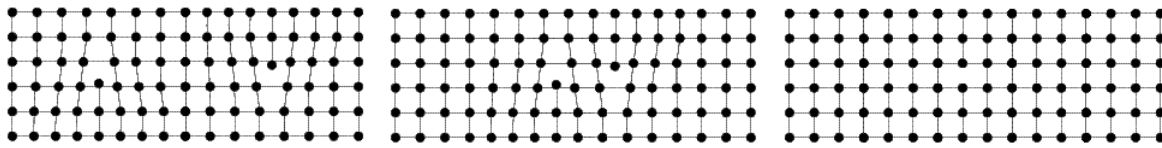


Bild 2-19: Stadien während Annihilation von stufenförmiger Versetzung (1 links nach 3 rechts)

In einem ersten anschaulichen Gedankenmodell ist es nachvollziehbar, dass sich die Atome in der Nähe des eindimensionalen topologischen Defekts „Versetzung“ in Relation zur idealen perfekten Kristallgitterstruktur nicht auf ihrer energetisch günstigsten Lage befinden, sondern eine höhere potentielle Energie besitzen. Man kann sich die reale versetzungsimmanente Gitterstruktur in der Nähe dieser Defekte als verspannt vorstellen, was wiederum unmittelbar auf den zuvor erwähnten energetisch höheren und somit ungünstigeren Zustand rekurrerbar ist. Eine Veränderung der Versetzungslinienform bzw. Vergrößerung der Versetzungslänge erfordert demnach ebenfalls Arbeit, weil daraus meist ein energetisch ungünstigerer Endzustand im System resultiert. Physikalisch-mathematisch lassen sich aus den beschriebenen Modellansätzen mit Hilfe der linearen Elastizitäts- sowie Potentialtheorie innere mechanische Spannungen berechnen, welche durch die Versetzungsstrukturen im Kristall selbst induziert werden. Da sich im Allgemeinen sehr viele solcher Versetzungslinien in metallischen Werkstoffen befinden, ist es nachvollziehbar, dass sich die Versetzungen über ihre im Gitter induzierten Spannungsfelder gegenseitig beeinflussen bzw. untereinander interagieren. Da exakte mathematisch-physikalische Ausführungen des eben genannten Konzepts den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden, sei an dieser Stelle nur auf die Literatur verwiesen (Hirth & Lothe, 1982) (Hull & Bacon, 2001). Den fundamentalen gedanklichen Ansatz in dieser Modellvorstellung stellt die Verknüpfung zwischen der realen diskreten bzw. punktförmigen Kristallgitterstruktur und den räumlich verteilten Spannungen dar, da bekanntlich ein Gitter nur aus einer Knotenmenge sowie aus einer Kantenmenge, mit der die Nachbarschaftsdefinitionen der Gitterpunkte beschrieben werden, besteht. Der Raum zwischen den Gitterpunkten ist leer, was bedeuten würde, dass eine kontinuierliche Verteilung von physikalischen Größen nicht abzubilden wäre. Um eine kontinuierliche Darstellungsweise zu ermöglichen, stellt man sich den gesamten vom Kristallgitter umschlossenen Raum als ein Kontinuum mit ideal elastischen Eigenschaften vor, das konform zu den im Kristallgitter vorhandenen Versetzungen belastet bzw. deformiert wird. Im Folgenden wird versucht, anschauliche Zugänge zur Einführung einer physikalischen Größe zu geben, welche im Anschluss daran über einen exakten formalisierten kontinuumsmechanischen Weg zusätzlich hergeleitet wird.

Eine wichtige, einfach einzuführende Größe stellt die sogenannte „Linienspannung“ w_L dar. Durch die räumlich beschränkten verzerrten Teilbereiche des Kristallgitters, welche durch den lokalen Defekt „Versetzung“ verursacht sind, werden mechanische Spannungen induziert, denen man elastische Energien zuordnen kann, die wiederum über eine Potentialtheorie beschreibbar sind. Diese Energien sind direkt den Versetzungen zuzuordnen. Bezieht man diese durch eine Versetzung verursachte Energie auf die Einheitslänge dieses eindimensionalen Defekts, so erhält man einheitenmäßig eine Kraft. Damit ist die sogenannte Linienspannung w_L definiert. Eine Vergrößerung der Versetzungslänge erfordert Arbeit, ähnlich dem Verlängern einer gespannten Saite. Daher ist die Linienspannung gleich der Kraft, mit der eine Versetzungslinie „gespannt“ ist. Mit der Kontinuumsmechanik kann man die durch eine Versetzung induzierten modellhaften (elastischen) Spannungen über die potentielle Energie mittels der Verzerrungsenergie quantitativ beschreiben. Diese Verzerrungsenergie erhält man durch Integration über das von der Versetzung begrenzte endliche spannungsinduzierte Volumen und ist zusätzlich noch auf die Einheitslänge des eindimensionalen Kristallgitterdefekts zu beziehen. Die so erhaltene Größe entspricht der Linienspannung w_L bzw. ist das kontinuumsmechanische Äquivalent zu dieser und durch den nachfolgenden Ausdruck approximativ gegeben

$$w_L = \alpha G b^2, \quad (\text{Rel. 2-64})$$

wobei b der Burgers-Vektor, G der Schubmodul sowie α eine empirische Konstante ist, die von der Charakteristik der Versetzung abhängt und zwischen 0.5 und 1 liegen kann. Der kleinere Wert 0.5 ist einer

reinen Schrauben- und der größere Wert 1 einer reinen Stufenversetzung zugeordnet. Werte die zwischen diesen Grenzen liegen, charakterisieren gemischte Versetzungen.

Die Linienspannung w_L kann analytisch auf relativ einfachem Weg über elementare elastizitätstheoretische Überlegung bestimmt werden. Dabei startet man bei der Kinematik von Schrauben- bzw. Stufenversetzung, wobei deren Verzerrungen und Spannungen im kontinuumsmechanischen Sinn modellhaft idealisiert werden. Aus diesen Annahmen kann das Verschiebungsfeld (Defektbewegung) einer Schraubenversetzung mit der Definition einer konstanten Steigung k für einen beliebigen Winkel θ

$$k := \frac{u_z(\vec{x})}{\theta} = \frac{u_z(x,y,z)}{\theta} = \frac{b}{2\pi} \quad \tan \theta = \frac{y}{x} \quad (\text{Rel. 2-65})$$

in vektorieller Form durch

$$\vec{u}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} u_x(\vec{x}) \\ u_y(\vec{x}) \\ u_z(\vec{x}) \end{pmatrix} = \vec{u}(x, y, z) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x} \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-66})$$

dargestellt werden. Das Verschiebungsfeld einer Stufenversetzung ist nicht durch elementare Überlegungen bestimmbar, weshalb auf eine exakte Herleitung verzichtet wird. Bei diesem Versetzungstyp zeigt sich durch offensichtliche geometrische Eigenschaften lediglich, dass die Verschiebungen und daher auch die Dehnungen in z -Richtung Null sind. Das hier ohne Beweis angeführte Verschiebungsfeld (Defektbewegung) einer Stufenversetzung lautet

$$\vec{u}(x, y, z) = \frac{b}{2\pi} \begin{pmatrix} \tan^{-1} \frac{y}{x} + \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{xy}{x^2+y^2} \\ \frac{1}{2(1-\nu)} \frac{y^2}{x^2+y^2} - \frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \log \sqrt{x^2+y^2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-67})$$

wobei in dieser Beziehung der Burgers-Vektor \vec{b} parallel zur x -Achse und der Linienvektor \vec{t} parallel zur z -Achse des Koordinatensystems liegen. Aus der Definition des linearisierten Verzerrungstensors können die für das lineare Hooke'sche-Stoffgesetz benötigten kinematischen Größen ermittelt werden, wobei für eine Schraubenversetzung diese sich in Form von

$$\bar{\epsilon}(\vec{x}) = \bar{\epsilon}(x, y, z) = \frac{b}{4\pi} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{y}{(x^2+y^2)} \\ 0 & 0 & \frac{x}{(x^2+y^2)} \\ -\frac{y}{(x^2+y^2)} & \frac{x}{(x^2+y^2)} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-68})$$

ausdrücken lassen und für eine Stufenversetzung die Darstellung

$$\bar{\epsilon}(\vec{x}) = \bar{\epsilon}(x, y, z) = \frac{b}{4\pi} \begin{pmatrix} \frac{y[(3-2\nu)x^2 + (1-2\nu)y^2]}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & \frac{x(y^2-x^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & 0 \\ \frac{x(y^2-x^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & -\frac{y[(1+2\nu)x^2 + (2v-1)y^2]}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-69})$$

gilt. Bei beiden Deformationszuständen sieht man, dass es sich um ebene Verzerrungszustände handelt. Ebenfalls zu erkennen ist, dass keine Volumenänderungen beim Wandern von Schraubenversetzungen zu finden sind, wohingegen bei Stufenversetzungen im Allgemeinen durchaus Änderungen im Volumen stattfinden (nichtverschwindende erste Invariante!). Aus dem Hooke'schen Elastizitätsgesetz folgen schließlich die idealisierten Spannungen, welche den realen Kristall verzerren und die immanenten Energien innerhalb der Gitterstruktur bewirken. Die Spannungen lassen sich für eine Schraubenversetzung in der Form

$$\bar{\sigma}(\vec{x}) = \bar{\sigma}(x, y, z) = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{y}{(x^2+y^2)} \\ 0 & 0 & \frac{x}{(x^2+y^2)} \\ -\frac{y}{(x^2+y^2)} & \frac{x}{(x^2+y^2)} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-70})$$

angeben, sowie für einen stufenförmigen Kristalldefekt durch den Term

$$\bar{\sigma}(\vec{x}) = \bar{\sigma}(x, y, z) = \frac{Gb}{2\pi} \begin{pmatrix} \frac{y(3x^2+y^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & \frac{x(y^2-x^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & 0 \\ \frac{x(y^2-x^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & \frac{y(y^2-x^2)}{(v-1)(x^2+y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2vy}{(v-1)(x^2+y^2)} \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-71})$$

ausdrücken. Analysiert man die Ausdrücke sowohl des Verzerrungs- als auch des Spannungstensors bezüglich beider Versetzungsgrundtypen, so erkennt man, dass im Ursprung (im Versetzungskern) das Spannungs- und das Verzerrungsfeld divergiert – hier ist die lineare Elastizitätstheorie nicht mehr gültig!

Die Energiedichte ist laut Abschnitt 2.1 in der Form

$$e := \frac{1}{2} \bar{\sigma}(\vec{x}) : \bar{\varepsilon}(\vec{x}) = \frac{1}{2} \sigma_{ij}(x, y, z) \varepsilon_{ij}(x, y, z) \quad (\text{Rel. 2-72})$$

definiert, wobei man durch Integration über die (x,y)-Ebene die Energie pro Einheitslänge des Linienelements der Versetzung, die Linienenergie (=Linienspannung) w_L , erhält. Dieser Integrationsprozess erfolgt über einen rotationssymmetrischen Kreisring, weshalb es zweckmäßig ist, von kartesischen auf zylindrische Koordinaten überzugehen. Geometrisch-räumlich veranschaulicht, beschreibt man damit einen Schlauch mit endlicher Dicke um die eindimensionale Versetzungslinie, wobei für die berechnete Linienenergie des Defekts nur jene Anteile berücksichtigt werden, die sich innerhalb des Integrationsvolumens befinden:

$$w_L := \iint e \, dA = \iint e \, dx \, dy = \int_0^{2\pi} \int_{R_i}^{R_a} e \, r \, dr \, d\theta \quad (\text{Rel. 2-73})$$

Das Integrationsgebiet ist somit nach innen und außen abgeschnitten, da innen, also im Zentrum bzw. Kern der Versetzung, die lineare Elastizitätstheorie nicht mehr gilt, während außen die Verzerrungsfelder irgendwo durch die anderen Versetzungen gestört werden. Auch bei nur einer einzelnen Versetzung würde bezüglich der Energie nach außen hin kein großer Fehler resultieren, da in jedem Fall Verzerrungen und Spannungen asymptotisch mit der 2. Ordnung rasch genug abklingen, wobei dieser Effekt durch die multiplikative Verknüpfung beider Größen sogar verstärkt wird. Üblicherweise setzt man für den das Gebiet nach innen begrenzenden Radius den Burgers-Vektor und für die äußere Begrenzung den mittleren Versetzungsabstand an. Außerdem erkennt man durch diesen Ansatz, dass nur jene Bereiche für die Linienenergie der Versetzung berücksichtigt werden, innerhalb derer die lineare Elastizitätstheorie gültig ist. Aus den eben beschriebenen Ansätzen erhält man schließlich für die spezifische Energie einer Schraubenversetzung den Ausdruck

$$e(x, y, z) = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \frac{1}{x^2+y^2} \Rightarrow e(r, \theta) = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \frac{1}{r^2} \quad (\text{Rel. 2-74})$$

wobei sich die gleiche Größe für eine Stufenversetzung folgendermaßen darstellen lässt.

$$e(x, y, z) = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \frac{1-v-\frac{v}{\sqrt{1+\frac{4x^2y^2}{x^4+2x^2y^2+y^4}}}}{(v-1)^2(x^2+y^2)} \Rightarrow e(r, \theta) = \frac{Gb^2}{8\pi^2} \frac{(1-v-v \cos(2\theta))}{(v-1)^2(x^2+y^2)} \quad (\text{Rel. 2-75})$$

Damit kann durch Flächenintegration die Energie pro Einheitslänge w_L der Versetzung bestimmt werden, wodurch man den Ausdruck

$$w_{L\parallel} = \underbrace{\frac{1}{4\pi} \log\left(\frac{R_a}{R_i}\right)}_{\text{konstant}} Gb^2 \Rightarrow w_{L\parallel} = \alpha_{\parallel} Gb^2 \quad (\text{Rel. 2-76})$$

für einen schraubenförmigen sowie

$$w_{L\perp} = \underbrace{\frac{1}{4\pi} \frac{1}{1-v} \log\left(\frac{R_a}{R_i}\right)}_{\text{konstant}} Gb^2 \Rightarrow w_{L\perp} = \alpha_{\perp} Gb^2 \quad (\text{Rel. 2-77})$$

für einen stufenförmigen Defekt erhält. Dabei fällt auf, dass die Linienenergie w_L nur durch den Schubmodul G sowie durch den Betrag des Burgers-Vektors b bestimmt ist, wobei es zweckmäßig ist, die rest-

lichen Größen, wie den Geometrieparameter $\log(R_a/R_i)$ sowie die übrigen dimensionslosen Terme (π , ν), zu einer Konstanten α zusammenzufassen.

Ebenfalls in diesem Zusammenhang steht der Mechanismus der Bewegung von Versetzungen durch einen realen Kristall. Dafür ist aber eine treibende Kraft nötig. Diese entsteht, wenn von außen ein Spannungsfeld aufgebracht wird. Allerdings laufen die Versetzungen nicht sofort los, da diese erst eine Art „Haftreibung“ in Form einer Schubspannung – oder in einem äquivalenten gedanklichen Modellansatz eine Energiebarriere in Form einer sogenannten Aktivierungsenergie – überwinden müssen. Die auf die Länge bezogene Kraft, welche ein mechanisches Spannungsfeld auf die vorliegende Versetzung ausübt, nennt man Peach-Köhler-Kraft und kann aus elementaren Überlegungen bestimmt werden. Ausgehend von einem vektoriell gerichteten Flächenelement $da_i = a \cdot n_i$, das die skalare Fläche a als auch die Orientierung dieser mittels eines senkrecht auf die Fläche stehenden Einheitsnormalvektors n_i beschreibt, kann ein infinitesimal kleines Flächenelement durch $da_i = da \cdot n_i$ berechnet werden, wobei dieser Ausdruck nur dann seine Gültigkeit hat, wenn der Flächeneinheitsnormalvektor n_i als konstant annehmbar ist. Bestimmt man die an einem Punkt der Versetzungslinie wirkende Spannung σ_i , so ist diese elementare Berechnung einfach durch die Anwendung des mechanischen Spannungstensors σ_{ij} auf den Einheitsnormalvektor n_i durchführbar $\sigma_j = \sigma_{ij}n_i$. Durch Multiplikation mit der dem Einheitsnormalvektor n_i zugeordneten differentiell kleinen Fläche da erhält man schließlich die infinitesimale Kraft $dF_j = \sigma_j da = \sigma_{ij}n_i da = \sigma_{ij}da_i$. Daraus ist wiederum die differentielle (skalare) Arbeit dW durch die (innere) Produktbildung mit dem im betrachteten Punkt sowie auf der gesamten Versetzungslinie konstanten Burgers-Vektor b_i aus $dW = dF_j b_j = b_j \sigma_{ij} da_i$ quantitativ bestimmbar. Nun lässt sich aber offensichtlich das gerichtete infinitesimale Flächenelement da_i auch durch das Linienelement dt_i der Versetzung, welches um den Weg ds_i verschoben wird, mit Hilfe des äußeren (Kreuz-)Produkts darstellen: $da_i = e_{ikl} dt_k ds_l$.

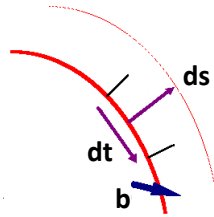


Bild 2-20: Linien- und Burgers-Vektor an Versetzung die in Richtung des Verschiebungsvektors bewegt wird

Damit kann zusammen mit der Symmetrie des Spannungstensors $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ sowie durch die folgenden Umformungen

$$dW = e_{ikl} dt_k ds_l \sigma_{ij} b_j = e_{lik} dt_k ds_l \sigma_{ij} b_j = e_{lik} \sigma_{ij} b_j dt_k ds_l \quad (\text{Rel. 2-78})$$

ein Ausdruck für die Arbeit ermittelt werden, welcher die Form eines Produkts aus Kraft $dF_l = e_{lik} \sigma_{ij} b_j dt_k$ und Weg ds_l , bezüglich des betrachteten Ortes auf der Versetzungslinie hat. Diese aus der Existenz der Versetzung resultierende Kraft muss offensichtlich von einer äußeren entgegengesetzt gerichteten Belastung aufgebracht werden, um den inneren Widerstand (Barriere) zu überwinden, damit eine Bewegung der Versetzung überhaupt möglich ist. Ersetzt man den bezüglich der Versetzungslinie infinitesimale Tangentenvektor dt_k , welcher aus dem differentiellen Flächenelement da_i hervorgegangen ist, durch seinen in dieselbe Richtung weisenden tangentialen Einheitsvektor $t_k := dt_k / \sqrt{dt_i dt_i}$, so folgt eine auf die Einheitslänge der Versetzungslinie bezogene Kraft K_l . Diese von außen aufzubringende längenbezogene Kraft K_l , welche für die Versetzungsbewegung nötig ist, nennt man Peach-Köhler-Kraft und ist nach dem Newtonschen Reaktionsprinzip

$$K_l = -F_l = -e_{lik} \sigma_{ij} b_j t_k = -e_{lki} \sigma_{ij} b_j t_k = e_{lki} t_k \sigma_{ij} b_j \quad (\text{Rel. 2-79})$$

leicht ermittelbar. Damit ist eine fundamentale Größe auf mikrostruktureller Ebene quantitativ erfasst, die in Verbindung mit weiteren Ansätzen sowie zusätzlichen mikromechanischen Modellen eine Basis für das in dieser Arbeit verwendete Konstitutivgesetz darstellt.

Als nächster Schritt soll nun die Kraftwirkung auf eine Versetzungslinie in Abhängigkeit der Krümmung untersucht werden. Der Grund hierfür liegt in der Stabilität von Versetzungslinien. Hierunter ist die Problematik zu verstehen, welche Morphologie von Versetzungslinien auftreten dürfen, damit diese entweder stationäre (stabile) oder aber instationäre (instabile) Zustände innerhalb der Kristallgitter

terstruktur annehmen, was – wie erwähnt – von den lokalen Krümmungen der Versetzungslinien abhängt. Gibt es im Kristall ein Versetzungssegment, das an beiden Enden (in Bild 2-21 die Punkte A und B) unbeweglich befestigt und einer Scherspannung in seiner Gleitebene ausgesetzt ist, so biegt es sich zu einem Bogen mit dem Radius R , da ja auf das Versetzungsstück die Peach-Köhler-Kraft wirkt.

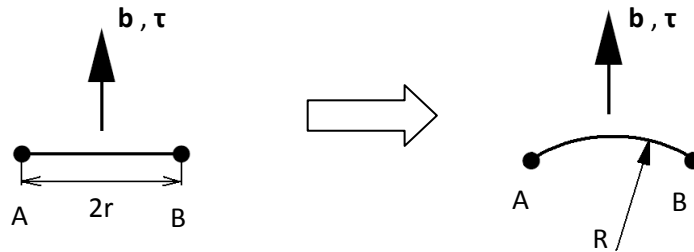


Bild 2-21: Deformation von Versetzung idealisiert durch Linie und Kreisbogen

Die beiden Punkte A und B kann man sich als kaum bewegbare Versetzungsknoten vorstellen, wobei es auch noch andere – in dieser Arbeit jedoch nicht beschriebene – ausgezeichnete Punkte im Kristallgitter geben kann, die zwar auf Versetzungslinien liegen, jedoch aufgrund lokaler Eigenschaften ihre räumliche Positionen praktisch kaum verändern können (bspw. Jogs). Durch den mikrostrukturellen Vorgang der Biegung einer Versetzungslinie infolge äußerer makroskopischer Belastungen nimmt die Versetzungslänge zu, d.h. es muss Arbeit geleistet werden. Die Gleichgewichtsbedingung kann man am einfachsten an einer geschlossenen kreisförmigen Versetzungslinie mit dem Prinzip der virtuellen Arbeit berechnen.

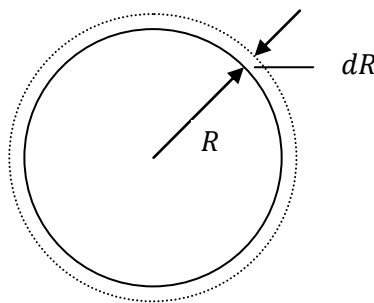


Bild 2-22: Aufweitung einer idealisierten kreisbogenförmigen Versetzungslinie

Bei geeigneter Spannung wirkt die auf die Versetzungslänge bezogene Peach-Köhler-Kraft immer radial nach außen und kann mit $K = \tau b 2\pi R$ angegeben werden. Wird der Radius von R auf $R + dR$ vergrößert, so leistet die Kraft K die Arbeit $dW_R = K dR = 2\pi \tau b R dR$ in radialer Richtung. Andererseits wird die Versetzungslinie in Umfangsrichtung offensichtlich zusätzlich verlängert, weshalb die hierfür nötige Arbeit aus der Definition der Linienenergie w_L , welche hier als konstant angenommen wird, durch $dW_U = -w_L 2\pi dR$ zu berechnen ist. Nach dem Prinzip der virtuellen Arbeit ist das System im Gleichgewicht, wenn die Gesamtarbeit verschwindet, woraus wiederum der Krümmungsradius der Versetzung bestimmt werden kann.

$$dW = dW_R + dW_U = 2\pi \tau b R dR - w_L 2\pi dR = 0 \Rightarrow R = \frac{w_L}{\tau b} \quad (\text{Rel. 2-80})$$

Wenn die Spannung steigt, so wird der Krümmungsradius kleiner. Wenn sich das Versetzungssegment also zu einem Bogen formt, wird der Krümmungsradius mit wachsender Spannung immer kleiner, bis schließlich $R = r$ vorliegt, d.h. der Krümmungsradius ist die Hälfte der ursprünglichen Versetzungslänge $2r$. Steigt die Spannung noch etwas weiter an, so gibt es kein Gleichgewicht mehr: Der Radius wird wieder größer, die Spannung jedoch nicht. Das Segment wird instabil und expandiert sehr schnell (siehe Bild 2-23 rechts).

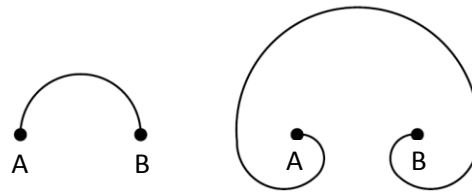


Bild 2-23: Stabilität von idealisierten Versetzungslinien (links...stabil ; rechts...instabil)

Es ist natürlich möglich, auch die Krümmung κ als Funktion der Schubspannung τ , des Burgers-Vektors b sowie der Linienspannung w_L auszudrücken, da bekanntlich die Krümmung κ über den reziproken Wert des Krümmungsradius R definiert ist, womit sich eine größer werdende Krümmung κ mit einem Anstieg der Schubspannung τ ergibt.

$$R^{-1} = \left(\frac{w_L}{\tau b} \right)^{-1} \Rightarrow \kappa = \frac{b}{w_L} \tau \quad (\text{Rel. 2-81})$$

Einen wichtigen Aspekt beim plastischen Fließen stellt das Vorhandensein von genügend vielen Versetzungen in der mikroskopischen Kristallgitterstruktur dar. Damit wird sichergestellt, dass die auf makrostruktureller Ebene von außen aufgetragenen Belastungen bzw. Deformationen überhaupt vom Werkstoff aufgenommen werden können, ohne dass seine Mikrostruktur dabei unbrauchbar oder sogar völlig zerstört wird. Andererseits ist es anschaulich nachvollziehbar, dass zu viele Versetzungen in der kristallinen Gitterstruktur sich in ihren Bewegungen gegenseitig behindern. Es ist nach den bisherigen Ausführungen leicht vorstellbar, dass die von den Versetzungen im Kristall aufgebauten lokalen Spannungsfelder interagieren und somit restriktiv auf die Versetzungsbewegungen wirken. Ist dies der Fall, so äußert sich diese Tatsache dadurch, dass das Material den von außen eingetragenen Deformationen bzw. Belastungen mehr Widerstand entgegensetzt. Üblicherweise wird dieses Phänomen als Verfestigung bezeichnet. Dieses Verhalten zeigen die meisten metallischen Werkstoffe während der ersten Phase ihrer plastischen Deformation, egal wie wenig oder wie viele Versetzungen sich im Initialzustand im Kristallgitter des Materials befunden haben. Somit ist eine logische Konsequenz daraus, dass es speziell bei geringer Versetzungspräsenz Mechanismen geben muss, um die Anzahl der Versetzungen in der Kristallgittermikrostruktur zu erhöhen, damit das Phänomen der Verfestigung überhaupt stattfinden kann. Der wohl wichtigste und bekannteste Ansatz zur Beschreibung der Versetzungsgenerierung ist die sogenannte Frank-Read-Quelle (Frank & Read, 1950). Wie bereits gezeigt, wächst die Linienspannung einer Versetzung mit ihrer Krümmung. Daraus ergibt sich der bereits erwähnte wichtige Mechanismus der Versetzungsmultiplikation bzw. Versetzungsvervielfältigung im Kristall, welcher im Bild 2-24 dargestellt ist

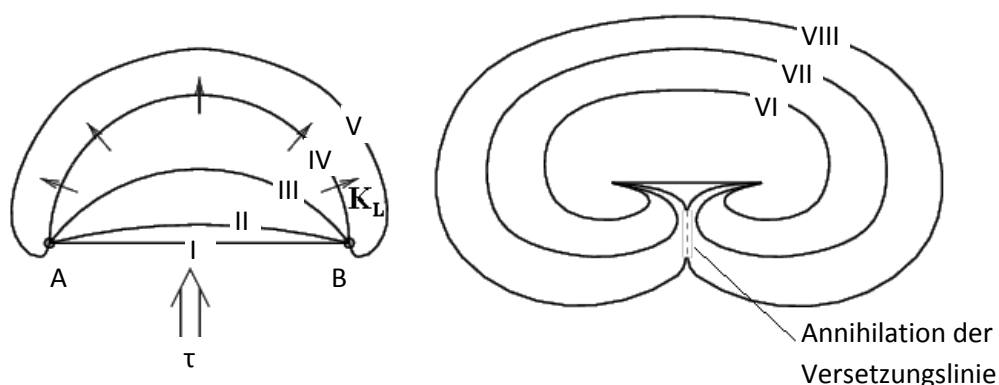


Bild 2-24: Schematische Darstellung von Versetzungsgenerierung durch den Mechanismus der Frank-Read-Quelle

und dessen Phasen während des Entstehungsprozesses im Folgenden genauer erklärt werden.

- I. Eine Versetzung werde an zwei Hindernissen (Punkte A und B seien bspw. Versetzungsknoten oder Jogs) festgehalten.
- II. Greift nun eine äußere Spannung τ an, beugt sich die Versetzung zwischen den Haltepunkten kreisbogenförmig aus.

- III. Der Widerstand, den die Versetzung der Spannung entgegensetzt, steigt zunächst stetig an, da die Krümmung des Bogens zunimmt.
- IV. Hat sie Halbkreisgestalt erreicht – falls die Richtungsabhängigkeit vernachlässigt wird – stellt dies genau den Grenzfall zwischen den stabilen und den instabilen Lagen dar.
- V. Nimmt die Größe der Versetzungsschleife um einen infinitesimal Betrag bezüglich des Halbkreisbogens zu, wird sie instabil, da nun die Krümmung wieder abnimmt – sie dehnt sich ohne zunehmende Spannung weiter aus.
- VI. Hierbei wickeln sich die beiden Endsegmente der Versetzungslinie, da die Peach-Köhler-Kraft K_L immer in Normalrichtung wirkt, um die Verankerungspunkte (A und B) herum.
- VII. Dabei laufen die hinten liegenden Segmente aufeinander zu, bis sie sich treffen und hierbei teilweise annihilieren, wodurch schließlich zwei, nicht mehr miteinander verbundene, Versetzungslinien entstehen.
- VIII. Gegen Ende des Vorganges wird der ursprüngliche (innere) Teil wiederhergestellt und es bleibt ein Versetzungsring um diesen (inneren) Versetzungsteil herum übrig, wobei der neu entstandene und durch Versetzungsannihilation abgekoppelte äußere Teil des eindimensionalen Liniendefekts sich weiter ausdehnt.

Anschließend kann der Prozess von neuem beginnen. Dieser Mechanismus wird als Frank-Read-Quelle bezeichnet. In ähnlicher Weise gibt es auch andere Möglichkeiten, aus einer Versetzung einen geschlossenen Ring abzulösen und so neue Versetzungen im Kristall zu erzeugen.

Abschließend sei im Zusammenhang der Versetzungsgenerierung erwähnt, dass es sich beim Konstrukt der Frank-Read-Quelle keinesfalls um ein bloßes Gedankenmodell handelt, sondern durchaus experimentell in der realen Kristallgitterstruktur nachgewiesen werden kann, was in Bild 2-25 zu erkennen ist.

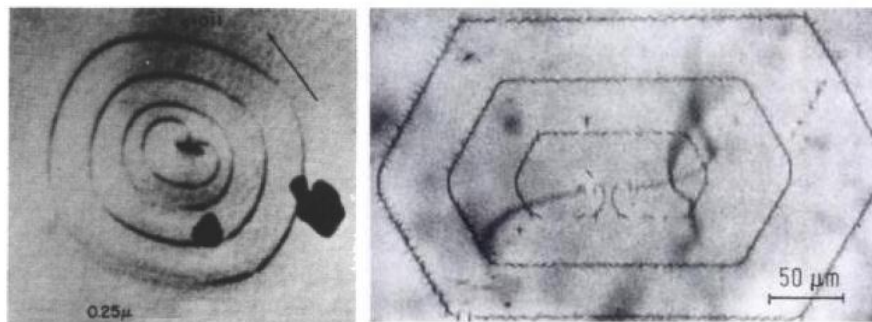


Bild 2-25: Transelektronenmikroskopische Aufnahmen an Frank-Read-Quelle (Dash, 1956)

Bei einem Simulationsmodell auf makroskopischer Ebene ist es aufgrund der riesigen Anzahl von Kristalldefekten unmöglich, jede einzelne Versetzung zu beschreiben. Hinzu kommt, dass kontinuumsmechanische Ansätze ein Materialverhalten oft ausreichend gut mit deutlich geringerem Rechenaufwand beschreiben können. Hierfür ist es ausreichend eine kontinuierlich verteilte Größe zu definieren, welche die Gesamtheit aller sich in einem betrachteten Volumen befindlichen diskreten Versetzungsobjekte beschreibt. In diesem Zusammenhang ist es naheliegend, eine Dichte von Versetzungen festzulegen. Da nach den bisher beschriebenen Eigenschaften die Versetzung durch die Länge der Versetzungslinie sowie durch den entlang dieser Linie konstanten Betrag des Burgers-Vektors festgelegt ist, liegt es nahe die Summe der Gesamtlängen aller Versetzungslinien innerhalb eines betrachteten Volumens als Definitionsgrößen für eine Dichte heranzuziehen.

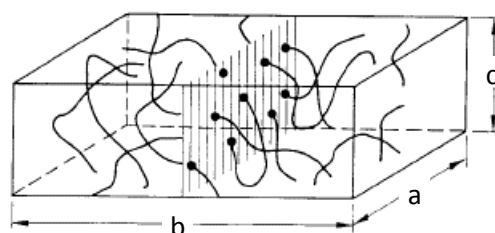


Bild 2-26: Versetzungen in einem beliebigen Volumen mit Querschnittfläche

Die Versetzungsdichte ρ ist definiert als die gesamte Länge der Versetzungslinien pro Einheitsvolumen des Kristalls. Somit ergibt sich für ein Volumen V mit einer gesamten Versetzungslinienlänge l folgende Versetzungsdichte:

$$\rho := \frac{l}{V} \quad (\text{Rel. 2-82})$$

Manchmal ist es praktisch, als alternative Definition der Versetzungsdichte die Zahl n der Versetzungen zu nehmen, die eine Einheitsfläche $A := ac$ (siehe Bild 2-26) schneiden, womit folgende Definitionsgleichung resultiert.

$$\rho' := \frac{n}{A} \quad (\text{Rel. 2-83})$$

Sind alle Versetzungen parallel, ergeben beide Definitionen die gleiche Versetzungsdichte. Sind die Versetzungen aber vollkommen zufällig orientiert, ergibt die volumenbezogene Versetzungsdichte ρ einen doppelt so hohen Wert wie die flächenbezogene Versetzungsdichte ρ' .

Typischerweise liegt die Versetzungsdichte in einem wärmebehandelten Metall zwischen 10^4 und 10^6 mm^{-2} . Nach einer Kaltverformung wie z.B. durch Walzen steigen die Werte auf etwa $5 \cdot 10^9 \text{ mm}^{-2}$. Daraus ist erkennbar, dass eine sehr große Anzahl von Versetzungen in einem metallischen Werkstoff vorliegen, weshalb man statistisch gesehen Wahrscheinlichkeiten bzw. deren beschreibende Größen wie Dichte- bzw. Verteilungsfunktion durch relative Häufigkeiten bzw. deren diskrete Verteilungsdiagramme in guter Näherung zur Approximation heranziehen kann. Dies ist der Ausgangspunkt zur Definition und Festlegung von mittleren Abständen von Versetzungen.

Folglich geht man in diesem Zusammenhang von einer idealisierten Gleichverteilung der Durchstoßpunkte der Versetzungen bezüglich des willkürlich – hier der Einfachheit halber rechteckig – gewählten Querschnitts aus. Im idealen Fall wären sämtliche n Versetzungsdurchstoßpunkte nach einem äquidistanten gitterähnlichen Schema angeordnet, wobei der Abstand sowohl in horizontaler als auch vertikaler Richtung l ist (siehe Bild 2-27).

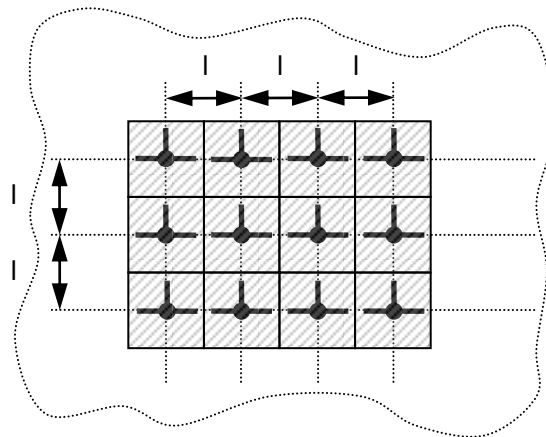


Bild 2-27: Idealisierte Anordnung gleichverteilter Versetzungen in beliebigem Flächenquerschnitt

In Bild 2-27 ist ein Ausschnitt des Gitters zu sehen, der die Gesamtfläche $A = ac$ (Bild 2-26) bedeckt, wobei exemplarisch an den eingezeichneten Durchstoßpunkten sich Stufenversetzungen befinden sollen, was für folgende Betrachtungen keinerlei Auswirkungen hat. Weil die Anzahl n der Versetzung hinreichend groß ist, kann diese gut durch ein ganzzahliges Produkt aus p Zeilen und q Spalten ($n, p, q \in \mathbb{N}^+$) eines (teilweise im Bild 2-27 dargestellten) Gitters approximiert werden, wobei das eingeführte Gitter in seiner Gesamtheit die Fläche $A := ac$ (Bild 2-26) bezüglich der Versetzungsdichtedefinition ρ' vollständig bedeckt. Aus den Produkten zwischen Zeilen- bzw. Spaltenanzahl des Gitters und dem einheitlichen Gitterabstand l sollen beide entsprechenden Rechteckseiten des betrachteten Querschnitts resultieren, was mit $a = pl$ sowie $c = ql$ darstellbar ist. Im Allgemeinen lassen sich aus den drei Gleichung ($a = pl$, $c = ql$, $n = pq$) die Größen p, q, l für reelle Zahlen eindeutig bestimmen, jedoch ist die Forderung, dass Zeilen- und Spaltenzahl ganzzahlig sein sollen, nicht immer erfüllbar, wobei die Abweichungen aufgrund der sehr großen Anzahl von Versetzungsdurchstoßpunkten meist vernachlässigbar gering ist. Nun kann für alle quadratischen Teilbereiche, welche in Bild 2-27 die Versetzungsdurchstoßpunkte umschließen, deren einheitlicher Flächeninhalt mit $A_V = 4 \cdot l/2 \cdot l/2 = l^2$ bestimmt werden,

wodurch sich die Gesamtfläche aus der Partialflächensumme des Querschnittgitters durch $A = pql^2 = nl^2 = nA_V$ berechnen lässt. Außerdem beträgt der Abstand einer beliebigen Versetzung zu seinen in horizontaler sowie vertikaler Richtung befindlichen nächsten Nachbarn genau l , nicht jedoch für jene in Diagonalrichtung. Liegt nun eine im statistischen Mittel gleichverteilte Anordnung von Versetzungen vor (Bild 2-28) und ordnet man jedem Versetzungsdurchstoßpunkt wiederum eine nach obigen Ausführungen identisch festgelegte quadratische (Teil)Fläche zu, so kommt es im Allgemeinen zu Überlappungen sowie Freiräumen zwischen diesen Partialflächen, wobei die Summe der Teilflächen, aufgrund des verwendeten Partialflächenzuordnungsschemas, offensichtlich die Gesamtfläche des betrachteten Querschnitts ist. Es ist auch nachvollziehbar, dass einerseits die wegen Überlappungen entstandenen mehrfach zu zählenden Flächenregionen sowie andererseits die nicht bedeckten und deshalb freien Flächenbereiche im statistischen Mittel fast identische Eigenschaften bezüglich der summarischen Gesamtfläche des untersuchten Querschnitts zeigen.

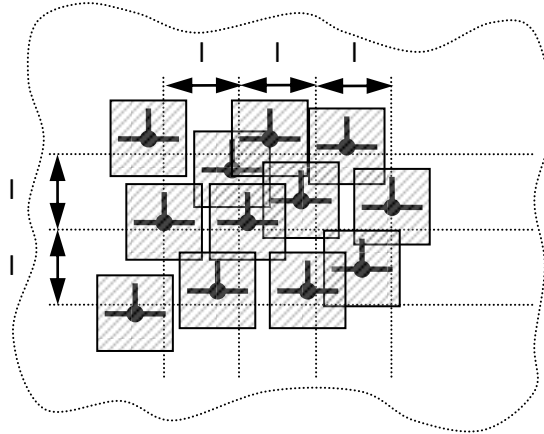


Bild 2-28: Exemplarisch allgemeine Anordnung gleichverteilter Versetzungen in beliebiger Querschnittfläche

Aufgrund der erwähnten Ansätze und Schlussfolgerungen kann ein mittlerer Abstand aus der Seitenlänge der quadratischen Partialfläche, welche den Versetzungsdurchstoßpunkten zugeordnet ist, ermittelt werden. Durch Einsetzen der oben eingeführten Größen in die flächenbezogene Definitionsgleichung der Versetzungsdichte folgt der statistisch gesehene mittlere Abstand der Versetzungen:

$$\rho' := \frac{n}{nl^2} = \frac{1}{l^2} \Rightarrow l = \frac{1}{\sqrt{\rho'}} \quad (\text{Rel. 2-84})$$

Als nächste Eigenschaft wird die plastische Deformation durch Bewegung von Versetzungen mittels eines relativ einfachen Modells beschrieben. Eine der wichtigsten mikrostrukturellen Erklärungsansätze zur Ermöglichung plastischer Deformationen, stellen die Ausdehnungsvorgänge einer Versetzungsschleife dar, welche beispielsweise durch den bereits beschriebenen Mechanismus einer Frank-Read-Quelle entstehen können. Durch die äußeren Belastungen resultieren im Allgemeinen Schubspannungen innerhalb einer Gleitebene, welche wiederum Ursache für die Vergrößerung bzw. Ausdehnung von dort vorliegenden Versetzungsschleifen ist. Dieser Prozess wird üblicherweise durch den Fachterminus Gleiten beschrieben und ist in Bild 2-29 schematisch dargestellt.

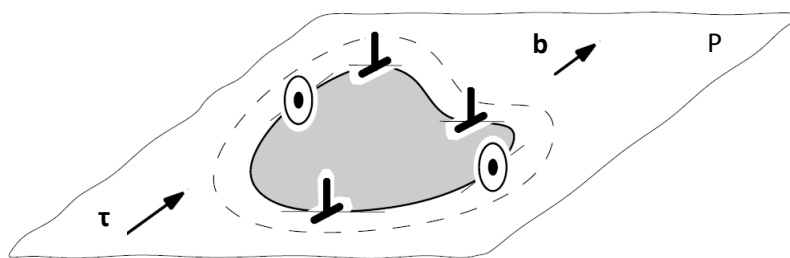


Bild 2-29: Wachstum eine Versetzungsschleife in idealisierter Kristallgitterebene (Gleiten)

Erreicht eine geschlossene Schleife einer Versetzung den Randbereich eines Kristallits, so hat sich die gesamte Gleitebene um einen Sprung in Richtung und Größe b des Burgers-Vektors verschoben. Aus den in Bild 2-30 idealisierten Gegebenheiten bezüglich Geometrie und Deformationszustand eines drei-

dimensionalen Modellkristalls, welcher durch drei unabhängige charakteristische raumbezogene Ausdehnungsparameter h , l und d quantifizierbar ist, resultiert ein Schubdeformationswinkel

$$\gamma = \frac{b}{h} \quad (\text{Rel. 2-85})$$

der wiederum auf eine über die ganze Gleitebene vollständig ausgeprägte Versetzungsschleife (siehe Bild 2-30 links) zurückgeführt werden kann. Wenn die geschlossene linienhafte Defektstruktur nur partiell (siehe Bild 2-30 rechts) über die Gleitebene des Kristalls ausgeprägt ist – wobei die teilweise geometrische Ausdehnung derselben mit einem charakteristischen Längenparameter x determiniert sei – wird der eben eingeführte Schubdeformationswinkel γ nur einen Bruchteil gegenüber der total ausgeprägten Versetzungsschleife annehmen. Die totale oder volle Ausprägung der geschlossenen Versetzungslinie sei ebenfalls durch einen charakteristischen Längenparameter quantifiziert, der sich auch auf dieselbe Gleitrichtung bezieht wie die eben eingeführte Größe x .

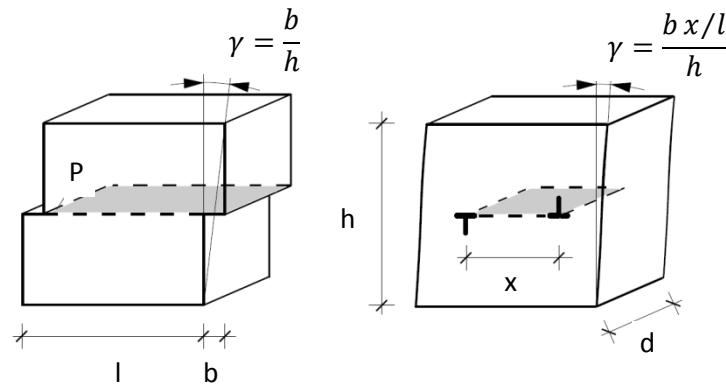


Bild 2-30: Idealisierte Kristalldeformation durch totale (links) und partielle (rechts) Versetzungsschleife

Somit erhält man durch eine simplifizierende lineare approximative Modellannahme bezüglich des Schubdeformationswinkels einer partiell ausgebildeten Versetzungsschleife innerhalb der betrachteten Gleitebenen den Ausdruck

$$\gamma = \frac{bx}{hl} \quad (\text{Rel. 2-86})$$

Im Allgemeinen befinden sich innerhalb einer Gleitebene eine Vielzahl von partiell ausgebildeten Versetzungsschleifen, deren Wirkung sich bezüglich der Gesamtverschiebung einer Gleitebene überlagert bzw. die alle zusammen zu einer resultierenden Größe zusammenfassbar sind. Dabei geht man wiederum von einem linearen Überlagerungsmodell der einzelnen partiell ausgebildeten Schleifen aus, womit die integral aufzufassende Größe x als summarischer Ausdruck aus den in derselben Gleitebene einzeln wirkenden partiellen geschlossenen Versetzungsschleifen mit

$$x := \sum_{i=1}^n x_i \quad (\text{Rel. 2-87})$$

angesetzt werden kann. Des Weiteren setzt man eine konstante Versetzungsdichte im Modellkristall nach Bild 2-30 an, was zu den folgenden Ausdrücke für flächen- bzw. volumenbezogenen Größen führt.

$$\rho' := \frac{n}{A} = \frac{n}{lh} \quad \rho := \frac{l}{V} = \frac{nd}{ldh} \quad (\text{Rel. 2-88})$$

Darin charakterisiert d die Länge der geschlossenen Versetzungsschleife um einen einzelnen Defekt. Außerdem ist ersichtlich, dass sowohl flächen- als auch volumenbezogene Versetzungsdichtedefinitionen zu selben Größen führen, wenn alle betrachteten Liniendefekte parallel sowie normal zum betrachteten Querschnitt sind. Durch Verwendung aller bis jetzt genannten Annahmen und Einsetzen derselben in die Gleichung des Schubdeformationswinkels γ , erhält man zusammen mit der als konstant angenommenen flächen- oder volumenbezogenen Versetzungsdichte ρ' bzw. ρ sowie der Einführung eines mittleren charakteristischen Raumausdehnungsparameters \bar{x}

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (\text{Rel. 2-89})$$

für die Gesamtheit der vorliegenden partiellen Versetzungsschleifen die Beziehung

$$\gamma = \frac{b \sum_{i=1}^n x_i}{h} \frac{1}{l} \frac{1}{n} n = \frac{b}{h} \frac{d}{l} \frac{n}{d} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = b \rho' \bar{x} = b \rho \bar{x} \quad (\text{Rel. 2-90})$$

Durch die partielle Ableitung bezüglich der Zeit folgt schließlich die sogenannte Orowan-Gleichung

$$\dot{\gamma} = b \rho' \dot{\bar{x}} = b \rho \dot{\bar{x}} \quad (\text{Rel. 2-91})$$

mit $\dot{\bar{x}}$ als mittlere oder durchschnittliche Geschwindigkeit

$$\dot{\bar{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \dot{x}_i \quad (\text{Rel. 2-92})$$

der Versetzungsbewegung. An dieser Stelle soll noch erwähnt werden, dass identische Beziehungen auch für Liniendefekte mit reinem Schrauben- oder allgemeinen gemischtem Versetzungscharakter folgen.

Schließlich wird als letzter Punkt die notwendige Schubspannung, welche innerhalb einer Gleiteben aufzubringen ist, beschrieben. Dafür betrachtet man exemplarisch zwei interagierende Stufenversetzungen, welche nach den bisherigen Ausführungen beide ein elastisches Spannungsfeld um sich besitzen. Würden beide Versetzungen in hinreichend großem Abstand voneinander entfernt sein, würden diese sich nicht in ihrem Bewegungsverhalten gegenseitig beeinflussen. Nun ist die reale Kristallgitterstruktur, in dem beide Liniendefekte sich befinden, räumlich begrenzt, weshalb beide Liniendefektstrukturen über ihre Spannungsfelder miteinander interagieren. Die erste Ursache hierfür ist die elastische Wechselwirkung paralleler (Stufen)Versetzungen, die später auch für die Erklärung der Verfestigung, d.h. der Zunahme der kritischen Schubspannung mit zunehmender Verformung, benötigt wird. Diese Annahme sowie das im Folgenden dargestellte Modell wurde erstmals von Taylor (Taylor, 1943) vorgestellt, weshalb man diesen Ansatz oft in entsprechender Literatur unter der Bezeichnung „Taylor-Modell“ vorfindet. Außerdem stellt diese Beschreibung das mikromechanisch motivierte Modell zur Herleitung des in dieser Arbeit verwendeten kontinuumsmechanischen Konstitutivgesetzes dar. Dieses Konstrukt startet von zwei Stufenversetzungen, welche durch die Indizes 1 und 2 unterschieden werden und mit den Versetzungslinienvektoren \vec{t}_1 bzw. \vec{t}_2 sowie den zugehörigen Burgers-Vektoren \vec{b}_1 bzw. \vec{b}_2 determiniert sind, wobei beide Defekte parallel zueinander vorliegen, woraus $\vec{t}_1 = \vec{t}_2 = \vec{t}$ folgt. Die eben eingeführten Vektoren können für Defekte mit Stufencharakter folgendermaßen dargestellt werden.

$$\vec{t}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{b}_k = \begin{pmatrix} b_1^k \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad k \in \{1,2\} \quad (\text{Rel. 2-93})$$

Die Erste Stufenversetzung (V1) liegt im Koordinatenursprung (0) und wird durch eine Kraftwirkung, welche aus dem Spannungsfeld des zweiten Liniendefekts (V2) resultiert, beeinflusst.

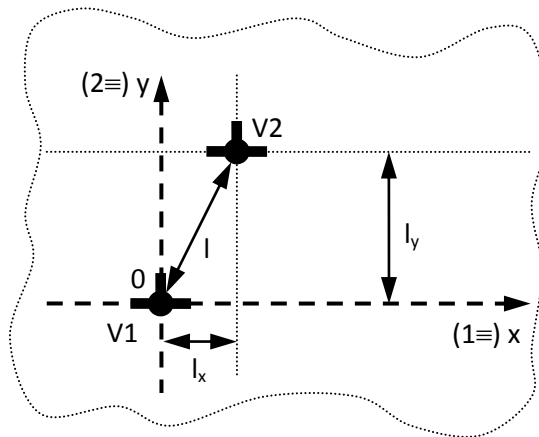


Bild 2-31: Modellhafte Anordnung zweier interagierender Stufenversetzungen

Deshalb ist eine Bewegung der ersten Versetzung mit einer Arbeit verbunden, welche energetisch durch die makroskopisch aufgebrachten äußeren Belastungen aufzubringen ist. Die Kraftwirkung auf die Erste Versetzung kann elementar aus der Peach-Köhler-Kraft, welche durch das Spannungsfeld des zweiten Defekts mit

$$\bar{\sigma}_2(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12}^2 & \sigma_{13}^2 \\ \sigma_{12}^2 & \sigma_{22}^2 & \sigma_{23}^2 \\ \sigma_{13}^2 & \sigma_{23}^2 & \sigma_{33}^2 \end{pmatrix} = \frac{Gb_1^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{(x^2+y^2)^2} \begin{pmatrix} y(3x^2+y^2) & x(y^2-x^2) & 0 \\ x(y^2-x^2) & y(3x^2+y^2) & 0 \\ 0 & 0 & 2xy \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-94})$$

determiniert ist, ermittelt werden

$$K_l = e_{lki} t_k \sigma_{ij}^2 b_j^1 = \frac{Gb_1^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{(x^2+y^2)^2} \begin{pmatrix} x(x^2-y^2) \\ y(3x^2+y^2) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-95})$$

wobei die Bewegung der Ersten Versetzung (V1) entlang der x-Achse oder in Richtung 1 erfolgt. Die erste Komponente ist die Kraft, die zur Versetzungsbewegung in der Gleitebene der Kristallgitterstruktur notwendig ist, und welcher das Hauptinteresse gilt. Die zweite Kraft bewirkt ein sogenanntes Klettern der Versetzung. Darunter versteht man eine Versetzungsbewegung entlang der Ordinatenachse (y Koordinate bzw. 2-Richtung), was ein nach oben bzw. unten drücken Defektstruktur aus der Gleitebene hinaus bedeutet. Der Effekt des Versetzungskletterns tritt allerdings nicht bei hinreichend niedriger Temperatur auf, weshalb dieses Phänomen meist vernachlässigt wird. Wenn nun zwei parallele Stufen (hier in Bild 2-31 V1 und V2) durch Bewegungen innerhalb der Gleitebene einander passieren, muss ein Maximum der horizontalen Komponente der Peach-Köhler-Kraft überwunden werden, was durch eine äußere Spannung, der Passierspannung, aufzubringen ist. Diese ergibt sich durch Extremwertbestimmung der Horizontalkomponente der Peach-Köhler-Kraft, welche die offensichtliche Ursache für das sogenannte Versetzungsgleiten darstellt. Daraus erhält man vier Lösungen, welche unterschiedlich stabile aber auch instabile Lagen der Versetzungen zueinander festlegen und die nachfolgend angegeben sind.

$$\frac{\partial K_1}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Gb_1^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} \right) = 0 \Rightarrow \begin{cases} x^1 = (+1 + \sqrt{2})y^1 \\ x^2 = (-1 + \sqrt{2})y^2 \\ x^3 = (+1 - \sqrt{2})y^3 \\ x^4 = (-1 - \sqrt{2})y^4 \end{cases} \quad (\text{Rel. 2-96})$$

Die Gleitkraft bewirkt für parallele Stufen eine stabile Anordnung der Versetzungen übereinander, wohingegen für antiparallele Burgers-Vektoren eine 45°-Anordnung stabil ist. Die maximal auftretende Kraft resultiert offensichtlich aus der größtmöglichen x-Koordinate, wobei letztgenannte laut Extremwertbestimmung die Größe $x = (+1 + \sqrt{2})y$ hat. Somit folgt durch Einsetzen eine Kraft

$$K := K_1^{\max} = K_1|_{x^1=(+1+\sqrt{2})y^1} = \frac{Gb_1^2}{8\pi(1-\nu)} \frac{1}{y} \quad (\text{Rel. 2-97})$$

die für ein Versetzungsgleiten notwendig ist. Geht man noch von gleichen Burgers-Vektoren $\vec{b}_1 = \vec{b}_2 = \vec{b}$ (bzw. $b_1^1 = b_1^2 = b_1 = b$) der beiden interagierenden unterschiedlichen Stufenversetzungen aus, was innerhalb eines Kristallits mit einheitlicher Gitterstruktur im Allgemeinen eine gerechtfertigte Annahme ist, vereinfacht sich der maximale Kraftausdruck weiter. Außerdem stellt die Peach-Köhler-Kraft laut Ableitung eine auf die Längeneinheit der Versetzungslinie bezogene spezifische Kraft dar. Da für eine Versetzungslinie der Burgers-Vektor b stets konstant ist, folgt dadurch mit einer Division desselben die notwendige Passierspannung τ :

$$K = \frac{Gb^2}{8\pi(1-\nu)} \frac{1}{y} \Rightarrow \tau := \frac{K}{b} = \frac{Gb}{8\pi(1-\nu)} \frac{1}{y} \quad (\text{Rel. 2-98})$$

Als letzter Schritt kann aus der Ableitung sowie der Definition der Versetzungsdichte bzw. des mittleren statistischen Abstandes von Versetzungsdurchstoßpunkten bezüglich einer beliebigen Ebene die unabhängige Variable y als der mittlere Versetzungsabstand identifiziert werden, woraus schließlich der Ausdruck

$$\tau = \frac{Gb}{8\pi(1-\nu)} \sqrt{\rho} \Rightarrow \tau = \alpha Gb \sqrt{\rho} \quad (\text{Rel. 2-99})$$

folgt, der die eigentlich relevante Größe der Versetzungsdichte beinhaltet. Diese Gleichung stellt die zur Versetzungsgleitbewegung notwendige Passierspannung dar, welche im Allgemeinen als sogenannte „Taylor-Spannung“ bzw. als „Taylor-Relation“ bezeichnet wird. Der aus mehreren Konstanten beste-

hende Vorfaktor α kann als ein empirischer Wert angesehen werden, dessen Größe meist aus experimentellen Untersuchungen zu ermitteln ist. Die Beziehung für die Taylorspannung stellt auf der mikrostrukturellen Ebene die zentrale Gleichung dar, auf der die vorliegende Arbeit aufbaut, wobei die weiteren Aspekte in der Differenzierung der Versetzungen gegeben sind und in weiterer Folge wie diese Versetzungsklassifikation auf die Verfestigungsmechanismen modellhaft angewendet werden können.

2.3 Konstitutive Beschreibungen zum Materialverhalten fester Körper

Im Allgemeinen verformen sich verschiedene Materialien unter den gleichen äußeren Belastungen unterschiedlich. Deshalb reichen die im Abschnitt 2.1 eingeführten Größen und Gesetzmäßigkeiten noch nicht aus, um den Zustand eines Körpers zu beschreiben. Mit den damit verbundenen Problemstellungen setzt sich dieser Abschnitt in kurzer Form auseinander und soll zunächst nur eine rein verbale Einführung in die wesentlichen physikalisch mathematischen Zusammenhänge geben. D.h. in dieser Einführung wird – in einem ersten Schritt – bewusst auf eine strenge mathematische Darstellung verzichtet, um die elementaren Termini und physikalischen Zusammenhänge auf einem leichter nachvollziehbaren Niveau darzustellen. Außerdem soll mit der gebräuchlichen Ausdrucksweise vertraut gemacht werden, damit die formalen Ausführungen in den nachfolgenden Abschnitten begreifbarer dargestellt werden können.

Die noch fehlenden Gleichungen sind Materialgleichungen, welche bei rein mechanischer Beschreibung des rheologischen Verhaltens von Stoffen einen Zusammenhang zwischen den im Kontinuum wirkenden Spannungen und Verzerrungen bzw. Verzerrungsgeschwindigkeiten herstellen. Diese Gleichungen konstituieren das Verhalten des betrachteten Stoffes und werden deshalb meist auch als Konstitutivgleichungen bzw. Konstitutivgesetz bezeichnet. Materialien sind also im Sinne der Kontinuumsmechanik als mathematische Modelle anzusehen, die das mechanische Verhalten von realen Stoffen unter definierten äußeren Bedingungen näherungsweise beschreiben. Somit ist ein Material durch seine Materialgleichungen definiert. Zur Formulierung dieser Materialgleichung bieten sich Tensorfunktionen als Hilfsmittel an. Um mit Hilfe der Kontinuumsmechanik das reale physikalische Verhalten von Stoffen richtig zu modellieren, müssen einige grundlegende Prinzipien erfüllt sein. Aus Platzgründen wird im Folgenden nicht auf alle, sondern nur auf einige dieser unbedingt einzuhaltenden Eigenschaften genauer eingegangen, weshalb die in diesem Abschnitt behandelten Prinzipien keinesfalls den Anspruch auf Vollständigkeit erheben. Für weiterführende Informationen sei auf weiterführende Literatur wie (Hutter & Jöhnk, 2004), (Becker & Bürger, 1975), (Ogden, 1984) verwiesen.

Bei der Formulierung von Materialgleichungen ist das Prinzip der materiellen Objektivität zu beachten, d.h. Beobachter, die sich unterschiedlich bewegen, müssen aus einer Materialgleichung auf denselben Spannungszustand schließen können. Eine Materialgleichung muss somit forminvariant gegenüber starrer Drehung oder Translation des Bezugssystems sein.

Zusätzliche Forderungen sind thermodynamisch begründet, so zum Beispiel die Verträglichkeit mit der Entropieungleichung (2. Hauptsatz der Thermodynamik).

Ein weiterer Aspekt bei Materialmodellen beruht auf der Spannungsleistung in jedem infinitesimalen Volumenelement. Die Spannungsleistung kann als Funktion des Verzerrungsgeschwindigkeits- und Spannungstensors ausgedrückt werden, wobei diese Leistung unabhängig von dem verwendeten Verzerrungsmaß sein muss. Deshalb ist zu jedem Verzerrungstensor ein konjugierter Spannungstensor zu ermitteln, der die Eigenschaft besitzt, dass die Leistung im Volumenelement auch quantitativ richtig beschrieben wird.

In den folgenden beiden Abschnitten werden Materialmodelle vorgestellt, die einerseits auf lokalen andererseits auf nichtlokalen Modellansätzen basieren. Im weiteren soll erläutert werden, was mit den Begrifflichkeiten lokal und nichtlokal gemeint ist. In der Kontinuumsmechanik wird zur Lösung der vorliegenden Problemstellung meist die klassische Feldtheorie aus der Physik verwendet. In diesem Zusammenhang soll auf sehr kleine geometrische Dimensionen hingewiesen werden, die im Bereich von einigen hundert Nanometern liegen können, in der dann auch die Quantenfeldtheorie, welche die zweite große Modellvorstellung in der theoretischen Physik darstellt, Anwendung finden kann. Die Begriffe lokale und nichtlokale Modellierung stammen jedoch ursprünglich aus dem Zusammenhang der klassischen und historisch älteren Feldtheorie (Kröner & Datta, 1966). Von einer lokalen Theorie spricht man, wenn die Feldgrößen ausschließlich Funktionen vom Ort (materieller Punkt) sind sowie optional noch von der Geschichte genau dieses Ortes (materieller Punkt) abhängen. Unter der Geschichte ist die Evolution bestimmter Feldgrößen in Abhängigkeit eines skalaren Parameters, der die Zeit bzw. einen Lastinkrementfaktor darstellen kann, zu verstehen. Diese Belastungsgeschichte wird meist in Form von Dif-

ferentialgleichungen bezüglich des Evolutionsparameters (bspw. Zeit) formuliert (vgl. Abschnitt 2.3.1.2 Plastizität). In diesem Zusammenhang spricht man in der Kontinuumsmechanik oft von der Belastungsgeschichte, die ein materieller Punkt erfahren hat, wobei folgende Unterscheidung zweckmäßig ist:

- Der Zustand des betrachteten Punktes hängt von der gesamten Belastungsgeschichte ab, was bedeutet, dass der momentane Zustand von allen Zuständen, welche dieser in der Vergangenheit angenommen hat, resultiert.
- Der Zustand eines Punktes hängt nur partiell von der Belastungsgeschichte ab. Hier ist der momentane Zustand nicht von allen, sondern nur von einer Untermenge der gesamten in der Vergangenheit angenommenen Belastungszustände des betrachteten materiellen Punktes abhängig. Diese Untermenge stellt meist ein zusammenhängendes, in die Vergangenheit gerichtetes Intervall bezüglich jenes Parameters dar, der die Belastungsgeschichte beschreibt, ausgehend vom aktuellen Wert dieses Evolutionsparameters.

Von einem nichtlokalen Modell spricht man, wenn die konstitutiven Gleichungen nicht mehr vom einzelnen betrachteten materiellen Punkt und dessen Belastungsgeschichte, sondern auch von Punkten und deren Belastungsgeschichte aus der Nachbarschaft abhängen. Als Nachbarschaft kann dieses Gebiet den ganzen Körper oder nur eine Untermenge desselben darstellen. In diesem Zusammenhang ist es noch wichtig zu erwähnen, dass Änderungen von Feldgrößen in der unmittelbaren Nachbarschaft des betrachteten Punktes sofortige Änderungen in den Gradienten der Feldgrößen nach sich ziehen. Daraus kann man den direkten Schluss ziehen, dass konstitutive Materialmodelle, welche örtliche Gradienten erster bzw. optional noch höherer Ordnung beinhalten, durch ihren mathematischen Beschreibungsansatz ebenfalls nichtlokale Materialmodelle darstellen. Enthalten Materialmodelle höhere Gradienten von tensoriellen Größen, so werden diese oft als Theorien höherer Ordnung bezeichnet. So enthält z.B. ein Modell 2. Ordnung im Allgemeinen einen nullten, ersten und zweiten örtlichen Gradienten bezüglich der unabhängigen Tensorfeldgröße, wobei allerdings entweder der 0. oder der 1. sowie auch beide Gradienten in der Beschreibung fehlen können, was allein durch die beschreibende Physik bestimmt wird. Diese beschreibende Physik kann sich auf unterschiedlichen Niveaus befinden sowie verschiedenste Phänomene oder Aspekte des Werkstoffverhaltens modellieren. In diesem Kontext besteht auch die Möglichkeit, verschiedene Verhaltensweisen eines Werkstoffs zu beschreiben, wozu mehrere physikalische Modelle erforderlich sind, welche jedoch miteinander gekoppelt werden müssen. Für das eben beschriebene Modellkonzept wird häufig eine sogenannte Mehrskalenmodellierung angewendet. Darunter versteht man Modell, bei denen mehrere physikalisch motivierte Theorien unterschiedliche Materialverhältnisse beschreiben, wobei jedes einzelne Modell nur innerhalb einer bestimmten Skala gültig ist, und durch unterschiedliche Methoden, wie bspw. Mittelung oder Energieäquivalenz, miteinander verknüpft werden. Es ist vorstellbar, dass diese Konzepte in ihrer Handhabung relativ aufwendig und komplex sind, jedoch die Möglichkeit bieten, makroskopische Phänomene aus mikroskopischen Überlegungen zu erklären und quantitativ zu beschreiben, was für ingenieurwissenschaftliche Anwendung von großer Bedeutung ist. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, die häufig gebrauchten Begriffe wie Skala und Mittelung bzw. Äquivalenzmethoden, die meist mit dem allgemeineren Terminus Homogenisierung belegt werden, genauer zu definieren.

Zunächst bezieht sich der Begriff Skala nicht nur auf eine geometrische Länge, da es in der Materialmechanik auch Probleme auf unterschiedlichen Zeitskalen gibt, wie z.B. langsam vorstattengehende Kriechprozesse, oder hochdynamische Schneide- oder Umformprozesse wie Stanzen, Tiefziehen etc. Eine Skala bezeichnet eine Maßeinteilung, mit der eine Größe, welche bei der kontinuumsmechanischen Mehrskalenmaterialmodellierung meist eine Länge ist, verglichen wird. Bei der Wahl einer bestimmten Skala kann diese aber nur Messgrößen erfassen, welche die verwendete Skala auch mit einer bestimmten Genauigkeit noch auflösen kann. Dies wird sofort klar, wenn beispielsweise an einem metallischen Werkstoff der Versuch unternommen wird, mit Hilfe von Geodreiecken Korngrößen zu messen, was mittels dieser Skala bzw. Erfassungssystems nicht möglich ist. Hierfür müsste man andere Systeme verwenden, um die auf dieser Skala befindlichen Objekte, in diesem Beispiel Körner, zu erfassen (bspw. Rasterelektronen- oder optische Lichtmikroskope). Im Kontext der Materialmodellierung würde dies bedeuten, dass man eine Theorie verwenden müsste, welche auf dieser Skala Gültigkeit besitzt, um so das Verhalten dieser Objekte hinreichend zu beschreiben. Dieses Konzept kann rekursiv von einer zur nächsten Skala hin angewendet werden, was zum Begriff mehrskalige Modellierung führt. Dieser Umstand klingt zwar banal, ist aber in den meisten Literaturstellen wenn überhaupt nur unzureichend dargestellt. Der Begriff Mehrskalenmodellierung sollte stets vom Terminus Homogenisierung getrennt angesehen werden, da Materialmodelle, die auf dem Konzept der Homogenisierung aufbauen, keines-

wegs mehrskalig sein müssen. Eine Homogensierung stellt im Wesentlichen eine Berechnung einer einzelnen integralen Größe dar, die einem materiellen Punkt zugeordnet wird. Diese Berechnung erfolgt aus einer Menge von Zuständen anderer materieller Punkte, welche sich innerhalb eines genau definierten Bereichs befinden müssen. Der Berechnungsprozess selbst muss sich nicht zwingenderweise auf ein Volumen beschränken, dessen beschreibende Theorie sich auf einer anderen Skala befindet, sondern das verwendete physikalische Modell kann sich durchaus auf dieselbe Skala beziehen.

Eine bereits aus den 1950er Jahren bekannte Theorie, welche unterschiedliche Skalen miteinander verknüpft, stellt die sogenannte Hall-Petch-Beziehung (Hall, 1951) (Petch, 1953) dar. Bei diesem Modell konnte aus experimentellen Beobachtungen eine Erhöhung der makroskopischen Festigkeitsgrenzspannungen metallischer Werkstoffe festgestellt werden, die unmittelbar mit den vorliegenden mikroskopischen Korngrößen des observierten Materials in Zusammenhang stand. Durch weitere Untersuchungen konnten Hall und Patch unabhängig voneinander einen quantitativen Zusammenhang zwischen der Anfangsfließspannung und der mittleren Korngröße ermitteln, der im Wesentlichen aussagt, dass die Erhöhung bzw. Erniedrigung der Fließspannung (Streckgrenze) direkt proportional zur reziproken Quadratwurzel des mittleren Korngrößendurchmessers ist. Die Proportionalitätskonstante beschreibt den Korngrenzwiderstand. Daraus ist ersichtlich, dass die makroskopische Festigkeit eines metallischen Werkstoffes mit dem Kleinerwerden der im Material vorliegenden Körner steigt.

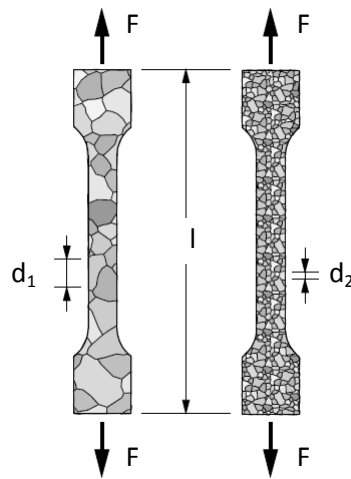


Bild 2-32: Exemplarische Verhältnisse der Korngrößendurchmesser in (Zug-)Probe zur Illustration des Hall-Petch-Effekts

Anders ausgedrückt weisen feinkörnigere Metalle höhere makroskopische Festigkeitswerte auf als grobkörnige, wobei die Korngröße durch spezielle Wärmebehandlungsverfahren wie bspw. Glühen beeinflusst werden kann. Aus dieser recht einfachen Theorie kann gefolgert werden, dass für den vorliegenden Fall grundsätzlich kontinuumsmechanische Theorien höherer Ordnung verwendet werden müssen, wenn die makroskopischen Bauteilabmessungen (Größe l in Bild 2-4) ähnliche Größenordnungen aufweisen wie die intrinsischen Ausdehnungen (Größen d_1 und d_2 in Bild 2-4) der mikroskopischen Objekte (Körner, Kristallite, etc.), aus denen das Material aufgebaut ist. Damit ist eine zusätzliche Motivation gegeben, welche die Notwendigkeit der Anwendung von komplexeren Theorien zur Beschreibung des Materialverhaltens manifestiert. Wie bereits angedeutet, muss dann die Mikrostruktur des Materials mitberücksichtigt werden, wobei dies mit Hilfe rein phänomenologischer Ansätze oder aber durch Miteinbeziehung von mikromechanischen Beschreibungsansätzen in das Materialmodell umgesetzt werden kann.

2.3.1 Lokale Modelle

Zum Einstieg in die phänomenologische Modellierung von komplexen Materialien ist es zweckmäßig, einfaches und überschaubares Werkstoffverhalten physikalisch zu motivieren sowie mathematisch zu beschreiben. Deshalb soll mit lokalen Theorien eine erste Einführung dargelegt werden.

2.3.1.1 Elastizität und Isotropie

Allgemein kann die Spannung S_{ij} eines elastischen Körpers durch eine der Materialgleichungen

$$S_{ij} := \hat{f}_{ij}(F_{kl}) = \tilde{f}_{ij}(C_{kl}) = \check{f}_{ij}(E_{kl}) \quad (\text{Rel. 2-100})$$

definiert werden, wobei der unverformte Zustand des Körpers auf den Nulltensor führt. Bei Hyperelastizität wird darüber hinaus noch die Existenz eines konvexen elastischen Potentials ψ , das auch als Verzerrungsenergiefunktion bezeichnet wird, vorausgesetzt. Somit geht das hyperelastische Materialmodell von der Reversibilität des rein elastisch verformten Kontinuums durch die im Körper gespeicherte Verzerrungsenergie aus. Wird das freie elastische Potential ψ beispielsweise als Funktion des rechten Cauchy-Green-Tensors C_{ij} ausgedrückt,

$$\psi = \hat{\psi}(C_{ij}) = \hat{\psi}(F_{ki} \cdot F_{kj}) = \hat{\psi}(F_{ij}) \quad (\text{Rel. 2-101})$$

so führt die Ableitung der freien Energiefunktion nach C_{ij}

$$S_{ij} = \frac{\partial \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij}} = \hat{f}_{ij}(C_{kl}) \quad (\text{Rel. 2-102})$$

zum Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor S_{ij} .

Der Beweis für die Ermittlung der Spannung durch Differentiation bezüglich eines die Kinematik der Deformation beschreibenden Tensors kann über die Formänderungsarbeit und die reversibel gespeicherte Energie dieser Arbeit geführt werden. Die einzige und dafür ist, dass die reversible gespeicherte Energie sich als Potential einer skalaren Größe darstellen lässt, welche von einem Tensor abhängt, der die Kinematik eindeutig beschreibt. Für die Beweisführung werden exemplarisch Größen aus der linearen Theorie kleiner Deformationen verwendet, wobei die Vorgehensweise für nichtlineare Kinematik analog ist. Durch Äquivalenz der nach Abschnitt 2.1.2 infinitesimalen Formänderungsarbeit dw und dem totalen Differential der als reversibel angenommenen Energiedichtefunktion $d\psi = d\tilde{\psi}(d\varepsilon_{kl})$

$$dw = \sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} \quad d\psi = \frac{\partial \tilde{\psi}(d\varepsilon_{kl})}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot d\varepsilon_{ij} \quad dw = d\psi \quad (\text{Rel. 2-103})$$

folgen mittels Vergleich der Koeffizienten die der Spannungen für hyperelastisches Verhalten durch einen Differentiationsprozess.

$$\sigma_{ij} \cdot d\varepsilon_{ij} = \frac{\partial \tilde{\psi}(d\varepsilon_{kl})}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot d\varepsilon_{ij} \Rightarrow \sigma_{ij} = \frac{\partial \tilde{\psi}(d\varepsilon_{kl})}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (\text{Rel. 2-104})$$

Soll das zu modellierende Material isotrope Eigenschaften aufweisen, kann gezeigt werden, dass die Potenzialfunktion nur mittels der Invarianten des rechten Cauchy-Green-Tensors angesetzt werden kann. Da jedoch die Invarianten auch durch die Eigenwerte λ_k des Tensors (C_{ij}) darstellbar sind, kann das elastische Potenzial auch durch diese ausgedrückt werden. Ein sehr allgemeiner und an Versuchsdaten gut anzupassender Ansatz ist durch

$$\tilde{\psi}(\lambda_k) := 2 \cdot \rho_0 \cdot \hat{W}(\lambda_k) \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \hat{W}(\lambda_k) := \hat{g}(J) + \sum_{i=1}^r \mu_i \cdot \hat{K}_i(\lambda_k) \\ \hat{K}_i(\lambda_k) := \frac{1}{\alpha_i} \cdot \sum_{j=1}^3 \lambda_j^{\alpha_i} \\ J := \det(F_{ab}) \end{cases} \quad (\text{Rel. 2-105})$$

gegeben, wobei der Term $\hat{g}(J)$ nur bei der Beschreibung von kompressiblen Materialverhalten berücksichtigt werden muss. Die Parameter μ_i und α_i sind dem zu modellierenden Material aus Versuchen anzupassen. Durch diesen Ansatz sind viele in der Praxis oft verwendete Materialmodelle wie Neo-Hooke, Mooney-Rivlin usw. darstellbar. Bezüglich der Materialparameter ist es noch wichtig zu erwähnen, dass diese die Bedingungen

$$\sum_{i=1}^r \mu_i \cdot \alpha_i = G \quad \text{und} \quad \mu_i \cdot \alpha_i > 0 \quad (\text{Rel. 2-106})$$

erfüllen müssen, damit Existenzsätze für die Lösungen der zugeordneten Anfangs-Randwertprobleme angegeben werden können. Darin stellt G den Schubmodul dar.

Exemplarisch ist abschließend noch die Darstellung der Spannungen S_{ij} mit Hilfe der Eigenwerte λ_k von C_{kl} , welche die Hauptdehnungen repräsentieren, angegeben, wobei zur abkürzenden Schreibweise die Substitution

$$\hat{\psi}(C_{kl}) := \tilde{\psi}(\lambda_k) := 2 \cdot \rho_0 \cdot \hat{W}(\lambda_k) := 2 \cdot \hat{w}(\lambda_k) \quad (\text{Rel. 2-107})$$

verwendet wurde. Durch Einsetzen von (Rel. 2-105) bzw. (Rel. 2-107) in (Rel. 2-102) folgt

$$S_{ij} = \frac{\partial \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij}} = 2 \cdot \frac{\partial \hat{w}(\lambda_k)}{\partial C_{ij}} = 2 \cdot \frac{\partial \hat{w}(\hat{\lambda}_l(C_{pq}))}{\partial C_{ij}} = 2 \cdot \frac{\partial \hat{w}(\hat{\lambda}_l(C_{pq}))}{\partial \lambda_k} \cdot \frac{\partial \hat{\lambda}_k(C_{pq})}{\partial C_{ij}} \quad (\text{Rel. 2-108})$$

$$S_{ij} = 2 \cdot \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \hat{w}(\hat{\lambda}_l(C_{pq}))}{\partial \lambda_k} \cdot \frac{\partial \hat{\lambda}_k(C_{pq})}{\partial C_{ij}}$$

wobei die partiellen Ableitungen $\partial \hat{\lambda}_k(C_{pq}) / \partial C_{ij}$ aus dem Eigenwertproblem

$$(C_{ij} - \lambda_k^2 \cdot \delta_{ij}) \cdot {}^k n_j = 0_i \quad (\text{Rel. 2-109})$$

und aus dem Ausdruck

$$\frac{\partial \hat{\lambda}_k(C_{pq})}{\partial C_{ij}} = \frac{1}{2 \cdot \lambda_k} {}^k n_i \cdot {}^k n_j \quad (\text{Rel. 2-110})$$

bestimmt werden können. In (Rel. 2-109) bzw. (Rel. 2-110) ist nicht über den 2- bzw. 3-fach vorkommenden Sub- bzw. Superskript k zu summieren, da dieser den k -ten Eigenwert sowie den zugehörigen Eigenvektor ${}^k n_i$ des rechten Cauchy-Green-Tensors C_{ij} darstellt. Somit kann die Eigenwertdarstellung der hyperelastischen Materialgleichung aus (Rel. 2-108) durch

$$S_{ij} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \hat{w}(\hat{\lambda}_l(C_{pq}))}{\partial \lambda_k} \cdot \frac{1}{\lambda_k} {}^k n_i \cdot {}^k n_j \quad \text{mit} \quad {}^k N_{ij} := \frac{1}{\lambda_k} {}^k n_i \cdot {}^k n_j \quad (\text{Rel. 2-111})$$

$$S_{ij} = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial \hat{w}(\hat{\lambda}_l(C_{pq}))}{\partial \lambda_k} \cdot {}^k N_{ij}$$

angegeben werden, wobei in (Rel. 2-111) die Summation bezüglich des 3- bzw. 4-fach vorkommenden Sub- bzw. Superskripts k ausschließlich über den Summenoperator durchzuführen ist, da k den k -ten Eigenwert sowie ${}^k n_i$ den zugehörigen Eigenvektor des rechten Cauchy-Green-Tensors C_{ij} darstellt.

2.3.1.2 Plastizität

Da ein wesentliches Ziel der Arbeit die mikrostrukturelle Modellierung von Plastizitätseigenschaften ist, soll in diesem Abschnitt kurz auf die klassische, kontinuumsmechanische Plastizitätstheorie eingegangen werden, was für ein zusammenhängendes Verständnis essentiell ist. Dabei muss jedoch erwähnt werden, dass dieses Materialmodell zur Simulation der Substrukturen nur partiell Anwendung findet, da die Materialeigenschaften der Mikrobereiche als nichtlinear elastisch angesetzt worden sind, was eine Beschreibung der Plastizitätseigenschaften im Rahmen der Deformationstheorie (vgl. Abschnitt 2.4) impliziert. Eine kurze Einführung in die klassischen Beschreibungsansätze zur Plastizität erscheint dennoch geboten, da diese eine zentrale Basis für das in der vorliegenden Arbeit verwendete Werkstoffmodell darstellt. Ein wichtiger Terminus bei plastischer Deformation ist das Fließen, worunter man die Deformation des Werkstoffs im plastischen Zustand versteht. Die wesentlichsten Merkmale des elastisch-plastischen Materialverhaltens sind:

- Abhängigkeit von der Verformungsgeschichte
- Irreversibilität des Fließvorgangs

Bei mehraxialer Werkstoffbeanspruchung wird in der Plastomechanik die Existenz einer Fließbedingung f angenommen. Die Fließbedingung stellt einen Zusammenhang zwischen den Spannungen bei Fließbeginn dar. Plastische Formänderungen können nur auftreten, wenn die Fließbedingung erfüllt ist. Die Fließbedingung kann geometrisch anschaulich im Hauptspannungsraum durch eine Fließfläche dargestellt werden. Spannungszustände, deren Bildvektoren innerhalb der Fließfläche liegen, sind elastisch. Bei Erreichen des Fließzustandes (Fließbeginn, Fließbedingung) ist es hilfreich, jene Modellvorstellung heranzuziehen, der zufolge die Fließfläche eines sich verfestigenden Werkstoffes in die Verfestigungsfläche übergeht. Die analytische Form dieser Verfestigungsfläche ist relativ kompliziert, da sie nicht nur vom Spannungszustand, sondern auch vom zugehörigen Verzerrungszustand und den Verfestigungsparametern abhängt. Diese Verfestigungsparameter sind wiederum Funktionen von den vorausgegangenen Belastungs- bzw. Verformungszuständen, d.h. von der Verfestigungsgeschichte. Aus diesen Gründen kann die Verfestigungsfläche ihre

- Größe (isotrope Verfestigung, im Folgenden durch die Größen a und y beschrieben)
- Lage (kinematische Verfestigung, im Folgenden durch die Größen α_{kl} und q_{kl} beschrieben)

- Gestalt(anisotrope Verfestigung, bleibt in dieser Beschreibung unberücksichtigt)

ändern.

Die Fließbedingung $f \leq 0$ erlaubt nur Spannungszustände, die entweder innerhalb (elastisch) oder aber genau auf (plastisch) dieser Verfestigungsfläche (Fließfläche) liegen. Spannungszustände außerhalb ($f \geq 0$) der Verfestigungsfläche sind unzulässig.

Bei inkompressiblen elastisch-plastischen Werkstoffen ist es zweckmäßig, deviatorische Größen zur Beschreibung des Materialverhaltens heranzuziehen.

Ein weiterer wichtiger Modellansatz zur Beschreibung plastischen Materialverhaltens bezieht sich darauf, ob große oder kleine Deformationen vorliegen. Bei kleinen Deformationen wird die Gesamtverzerrung in elastische und plastische Verzerrungen additiv aufgespalten. Hingegen erfolgt bei großen Deformationen eine multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten in einen elastischen und einen plastischen Anteil. Da die verwendeten Verzerrungen und der Deformationsgradient in unmittelbarem Zusammenhang stehen, werden im Folgenden ausschließlich „Verzerrungen“ (bspw. C_{ij}^e) als Funktionsargumente herangezogen, die sich aber stets auf bestimmte Konfigurationen des Körpers beziehen. Exemplarisch und um die Formulierung einfach sowie übersichtlich zu gestalten, ist hier die Darstellung in der Referenzkonfiguration gewählt worden, weshalb einfache Zeitableitungen aufgrund des festen Basissystems verwendet werden können. Dies macht die Verwendung einer objektiven Ratenformulierung (vgl. Abschnitt 2.1.4 „Zeitableitungen“) nicht erforderlich.

Wie bereits erwähnt, werden Verfestigungsvariablen α_{kl} bzw. a zur Beschreibung der Verfestigung und des Fließens verwendet. Diesen Verfestigungsvariablen α_{kl} bzw. a sind wiederum innere Variablen q_{kl} bzw. y zugeordnet, deren Zusammenhang über die zugrundegelegte Annahme der Existenz eines plastischen Potentials ψ^p gegeben ist, das oft wie folgt angesetzt wird:

$$\psi^p = \hat{\psi}^p(C_{ij}^e, \alpha_{kl}, a) := \hat{\psi}^e(C_{ij}^e) + \hat{\psi}^\pi(\alpha_{kl}, a) \quad (\text{Rel. 2-112})$$

Die Theorie des plastischen Potentials ergibt sich aus dem Prinzip der größten spezifischen Dissipationsleistung. Danach stellt sich der tatsächliche Spannungszustand bei einem vorgegebenen plastischen Verformungsinkrement so ein, dass die dissipative plastische Arbeit maximal wird. In unmittelbarem Zusammenhang mit der Existenz eines plastischen Potentials steht auch die Tatsache, dass die Konvexität der Fließbedingung für alle möglichen Deformationszustände stets gewährleistet sein muss. Die Berechnung der (deviatorischen) Spannungen s_{ij} , die hier nicht näher spezifiziert werden, und der den Verfestigungsvariablen α_{kl} bzw. a zugeordneten inneren Variablen q_{kl} bzw. y , kann durch die Ableitung dieses freien Potentials ψ^p nach ihren Argumenten erfolgen:

$$\begin{aligned} s_{ij} &:= \frac{\partial \hat{\psi}^p(C_{mn}^e, \alpha_{kl}, a)}{\partial C_{ij}^e} = \frac{\partial \hat{\psi}^e(C_{mn}^e)}{\partial C_{ij}^e} \\ q_{kl} &:= \frac{\partial \hat{\psi}^p(C_{ij}^e, \alpha_{mn}, a)}{\partial \alpha_{kl}} = \frac{\partial \hat{\psi}^\pi(\alpha_{mn}, a)}{\partial \alpha_{kl}} \\ y &:= \frac{\partial \hat{\psi}^p(C_{ij}^e, \alpha_{mn}, a)}{\partial a} = \frac{\partial \hat{\psi}^\pi(\alpha_{mn}, a)}{\partial a} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-113})$$

Um alle unbekannten Größen eines plastischen Werkstoffmodells eindeutig zu bestimmen, sind noch weitere Gleichungen notwendig. Dabei handelt es sich um die Evolutionsgleichungen der plastischen (deviatorischen) Verzerrungen \dot{e}_{ij}^p und der Verfestigungsvariablen $\dot{\alpha}_{kl}$ bzw. \dot{a} . Diese Gleichungen können folgenden zwei Arten von plastischen Materialmodellen zugeordnet werden:

- Assoziierte Plastizität

Hier werden die Inkremente der entsprechenden Variablen über einen Differentiationsprozess aus der bereits bekannten Fließbedingung f berechnet:

$$\begin{aligned} \dot{e}_{ij}^p &= \lambda \cdot \frac{\partial \hat{f}(s_{mn}, q_{kl}, y)}{\partial s_{ij}} \\ \dot{\alpha}_{kl} &= \lambda \cdot \frac{\partial \hat{f}(s_{ij}, q_{mn}, y)}{\partial q_{kl}} \quad \text{mit} \quad f = \hat{f}(s_{ij}, q_{kl}, y) \\ \dot{a} &= \lambda \cdot \frac{\partial \hat{f}(s_{ij}, q_{mn}, y)}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-114})$$

➤ Nicht-assozierte Plastizität

Hier werden die Inkremente der entsprechenden Variablen über weitere, dem Werkstoffverhalten angepasste und gegebene tensorielle bzw. skalare Funktionen $\hat{r}_{ij}(s_{mn}, q_{kl}, y)$, $\hat{h}_{kl}(s_{ab}, q_{mn}, y)$ bzw. $g(s_{ab}, q_{mn}, y)$ bestimmt:

$$\begin{aligned}\dot{e}_{ij}^p &= \lambda \cdot \hat{r}_{ij}(s_{mn}, q_{kl}, y) \\ \dot{\alpha}_{kl} &= \lambda \cdot \hat{h}_{kl}(s_{ab}, q_{mn}, y) \\ \dot{\alpha} &= \lambda \cdot g(s_{ab}, q_{mn}, y)\end{aligned}\quad (\text{Rel. 2-115})$$

Die unbekannten skalaren Faktoren, die in den Evolutionsgleichungen eingeführt werden, müssen noch die sogenannten Kuhn – Tucker – Optimalitätsbedingungen erfüllen und werden auch aus diesen bestimmt:

$$\begin{aligned}\lambda \geq 0 \quad , \quad \hat{f}(s_{ij}, q_{kl}, y) \leq 0 \quad , \quad \lambda \cdot \hat{f}(s_{ij}, q_{kl}, y) &= 0 \\ \Rightarrow \quad \lambda \cdot \dot{\hat{f}}(s_{ij}, q_{kl}, y) &= 0\end{aligned}\quad (\text{Rel. 2-116})$$

Von diesen Optimalitätsbedingungen wird im Rahmen der Kontaktmechanik in formal völlig analoger Art und Weise wiederholt Gebrauch gemacht, da sie die einzuhaltenden Nebenbedingungen in Ungleichungsform in einem mathematisch allgemeinen Ansatz erfassen und beschreiben.

Damit ist das plastische Werkstoffverhalten ausreichend dargestellt und es kann zur Beschreibung von weiteren für diese Arbeiten relevanten Materialverhalten im Rahmen der speziellen Kontinuumsmechanik übergegangen werden.

2.3.1.3 Viskose Eigenschaften

Der Begriff Viskosität stammt eigentlich aus der Kontinuumsmechanik der Fluide, deren phänomenologisches Verhalten durch identische Grundgleichungen nach Abschnitt 2.1 beschrieben werden, sich jedoch durch andersartige Materialgleichungen von festen Körpern unterscheiden. Im Gegensatz zum (elastisch) festen Körper, das die unbelastete – zumeist spannungsfreie – Konfiguration als ausgezeichneten Zustand und damit als natürliche Referenzkonfiguration besitzt, hat ein Fluid keine ausgezeichnete Konfiguration. Alle Konfigurationen des Fluids sind gleichwertig. Daher wählt man die jeweilige Momentankonfiguration als Referenzkonfiguration. Dies führt dazu, dass die Bewegung der Fluidpartikel in Eulerscher-, und nicht wie bei festen Strukturen in Lagrangescher Darstellung beschrieben wird. Die Beschreibung kontinuumsmechanischer Größen in Lagrangescher Darstellung erfolgt durch konstante ortsfeste Koordinaten der Referenzkonfiguration. Weil im Gegensatz dazu die Beschreibung derselben physikalischen Feldgrößen in Eulerscher Darstellung mittels sich zeitlich verändernden Koordinaten der Momentankonfiguration erfolgt, ist es nachvollziehbar, dass die Zeit als zusätzliche unabhängige Variable in Konstitutivgesetzen von Fluiden mit zu berücksichtigen ist. Da die Kinematik der Partikel mit abgeleiteten Größen aus dem Verschiebungsfeld (bspw. Verschiebungs-, Deformationsgradient, usw.) dargestellt wird, folgt durch die Miteinbeziehung der Zeit die Verwendung des transienten Verhaltens des Verschiebungsfeldes in Stoffgesetzen von Fluiden. Somit werden Konstitutivgesetze von Fluiden in Analogie zu festen Körpern zumeist durch die zeitliche Änderung der die Deformation beschreibenden Größen dargestellt. Deshalb kann der Spannungstensor im Fluid als Funktion der Verzerrungsgeschwindigkeiten \dot{E}_{ik} (bzw. räumlichen Geschwindigkeitsgradienten $l_{ij} := \partial v_i / \partial x_j = \dot{F}_{ik} \cdot F_{kj}^{-1}$ usw.) oder äquivalenter, die zeitliche Änderung der Kinematik jedoch ausreichend quantifizierender, Größen dargestellt werden.

$$\sigma_{ij} := \hat{\sigma}_{ij}(\dot{E}_{kl}) \Leftrightarrow \hat{g}_{ij}(\dot{E}_{kl}, \sigma_{mn}) = 0_{ij} \Leftrightarrow \hat{h}_{ij}(l_{rs}, \sigma_{mn}) = 0_{ij} \quad (\text{Rel. 2-117})$$

Die oben angegebenen äquivalenten Darstellungen folgen unmittelbar aus der Überlegung, dass sowohl der räumliche Geschwindigkeitsgradient l_{ij} als auch die Verzerrungsgeschwindigkeiten \dot{E}_{ij} nur Funktionen vom Deformationsgradienten F_{ij} sowie dessen zeitlicher Ableitung \dot{F}_{ij} sind (vgl. 2.1.1).

Als physikalisch motiviertes eindimensionales Beispiel sei das Modell einer sich ideal verhaltenden Flüssigkeit verwendet, um einerseits die mathematische Struktur der eben beschriebenen Stoffgesetze von Fluiden weiter zu erläutern, andererseits aber auch die Viskosität bzw. was mit der Ausdrucksweise „viskose Eigenschaften von kontinuumsmechanischen Medien“ gemeint ist, zu beschreiben.

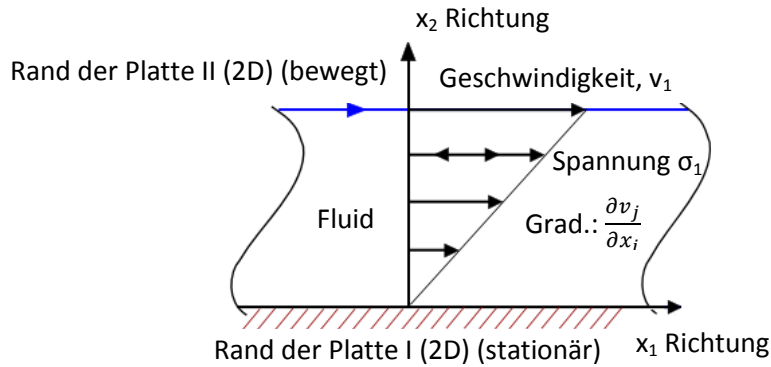


Bild 2-33: Modell zur Erklärung viskoser Eigenschaften von Fluiden

Man stelle sich zwei im Abstand x_2 angeordnete Platten der Fläche A vor. Zwischen diesen Platten befindet sich eine Flüssigkeit, die an beiden Platten haftet. In dieser Vorstellung soll der Raum mit der Flüssigkeit kontinuierlich in infinitesimal dünne Schichten unterteilt sein. Wird nun Platte P-II mit der Geschwindigkeit v_1 bewegt, so bewegt sich die Schicht in unmittelbarer Nachbarschaft zu Platte P-II auf Grund der Haftung ebenfalls mit der Geschwindigkeit v_1 . Außerdem kann davon ausgegangen werden, dass aufgrund der Art des Systems bzw. der äußeren Belastungen ausschließlich horizontale (Richtung 2) Bewegungen der Fluidpartikeln zu erwarten sind, alle anderen Komponenten sind Null. Da Platte P-I ruht, ruht auch ihre Nachbarschicht. Die innenliegenden Flüssigkeitsschichten gleiten mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten in horizontaler Richtung 1 aneinander vorbei. Die Geschwindigkeit nimmt von der ruhenden Platte P-I zur bewegten P-II zu. Im einfachsten Fall besteht eine lineare Abhängigkeit. Von der obersten, an der Platte P-II haftenden Schicht geht eine Tangentialkraft auf die darunterliegende Schicht aus. Diese bewegt sich folglich mit der Geschwindigkeit 1v_1 . Diese Schicht wirkt wiederum auf die darunterliegende Schicht und bewegt sie mit der Geschwindigkeit 2v_1 .

Im Experiment lässt sich zeigen, dass die Kraft F_1 , die nötig ist, um Platte P-II zu bewegen, proportional zu ihrer Fläche A , ihrer Geschwindigkeit v_1 und antiproportional zu dem Abstand der Platten x_2 ist:

$$F_1 \propto A \quad , \quad F_1 \propto v_1 \quad , \quad F_1 \propto \frac{1}{x_2} \quad (\text{Rel. 2-118})$$

$$F_1 \propto \frac{A \cdot v_1}{x_2} \Rightarrow \frac{F_1}{A} = \eta \cdot \frac{v_1}{x_2} \Rightarrow \sigma_1 = \eta \cdot \frac{v_1}{x_2}$$

Aus der zuletzt genannten eindimensionalen Beziehung kann eine naheliegende Verallgemeinerung für das dreidimensionale Kontinuum formuliert werden, wobei diese Gleichung die einfachste Form eines Mediums mit rein viskosem Verhalten darstellt:

$$\sigma_{ij} = \eta \cdot \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) = 2 \cdot \eta \cdot d_{ij} \quad (\text{Rel. 2-119})$$

Die Proportionalitätskonstante η ist die dynamische Viskosität. Häufig wird sie auch nur als Viskosität bezeichnet. Ist η unabhängig von der Geschwindigkeit v , so wird die Flüssigkeit als Newtonsche Flüssigkeit bezeichnet. Für diese Flüssigkeiten stellt sich das eben beschriebene lineare Geschwindigkeitsprofil ein. Ist η von v abhängig, so bezeichnet man die Flüssigkeit als nicht-newtonsches Fluid. Durch den im viskosen Stoffgesetz für Fluide enthaltenen symmetrischen Anteil des räumlichen Geschwindigkeitsgradienten d_{ij} , der wiederum unmittelbar mit den Verzerrungsgeschwindigkeiten \dot{E}_{ij} über die Deformationskinematik F_{ij} durch $\dot{E}_{ik} = F_{li} \cdot d_{lj} \cdot F_{jk}$ (vgl. Abschnitt 2.1.1) verknüpft ist, folgt sofort, dass sich die im Medium einstellenden Spannungen größer werden, je rascher die Deformation durchgeführt wird. Umgekehrt verkleinern sich die Spannungen bei langsamer durchgeführten Deformationsvorgängen. Ein solches Verhalten bezeichnet man als viskos, wobei diese Eigenschaften nicht nur bei Flüssigkeiten bzw. Gasen anzutreffen ist, sondern auch bei Festkörpern sehr häufig vorkommt (bspw. Gummi, Kunststoffe etc.). Die physikalisch-mathematische Beschreibung des viskosen Verhaltens von Kontinua geht jedoch historisch gesehen primär auf fluide Medien zurück, weshalb dieser Terminus auch sehr oft mit Flüssigkeiten assoziiert wird. Allgemein kann also festgehalten werden, dass viskoses Verhalten einzig und allein nur die Spannungsabhängigkeit von der Deformationsgeschwindigkeit zum Ausdruck

bringt, wobei diese Abhängigkeit sowohl in linearer als auch in nicht-linearer Form auftreten kann. In diesem Abschnitt werden vorwiegend nur linear viskose Materialeigenschaften beschrieben.

Bei festen Körpern findet man rein viskoses Verhalten stets in Kombination anderer Werkstoffeigenschaften, wie Elastizität und/oder Plastizität. Deshalb wird im Folgenden viskoelastisches und danach viskoplastisches Materialverhalten physikalisch sowie mathematisch kurz beschrieben.

Viskoelastisches Verhalten stellt eine Kombination von rein viskosem und rein elastischem Verhalten dar. Die technisch relevantesten zeitabhängigen Deformationsprobleme stellen einerseits der Kriechvorgang und andererseits der Relaxationsprozess dar. Diese beiden einfachsten viskoelastischen Materialverhaltensweisen werden im Folgenden anhand elementarer eindimensionaler Feder-Dämpfer Modelle kurz dargestellt und anschließend auf ein verallgemeinertes sich analog verhaltendes dreidimensionales Konstitutivgesetz erweitert. Innerhalb der eindimensionalen Modellierung bilden die Federn reine Elastizitätseigenschaften und der geschwindigkeitsproportionale Dämpfer rein viskoses Werkstoffverhalten des festen Körpers ab.

Als Erstes soll das Kriechen behandelt werden, welches im Wesentlichen durch die zeitlich sich verändernde Anpassung der Dehnung an eine konstant vorgegebene Spannung definiert ist. Die sich verändernde Anpassung der Dehnung hat asymptotisches Verhalten und strebt für hinreichend große Zeiten gegen einen stationären Dehnungswert. Kriechen kann am einfachsten mit einem eindimensionalen Kelvin-Voigt-Modell dargestellt werden. Dabei handelt es sich um eine Parallelschaltung einer linear elastischen Feder und eines linear viskosen Dämpfers, die nachfolgend dargestellt ist:

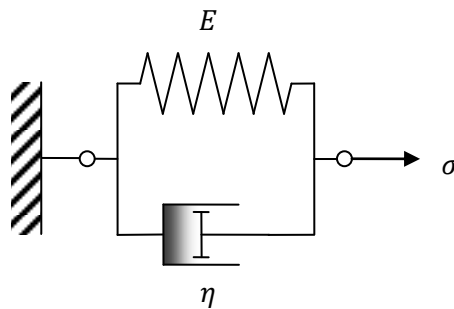


Bild 2-34: Modellierung viskoelastischer Eigenschaften von Festkörpern nach Kelvin-Voigt

Aus Bild 2-34 ist zu entnehmen, dass die Dehnung ε in Feder und Dämpfer gleich ist, während sich die Spannungen auf Feder und Dämpfer summarisch aufteilen, $\sigma = \sigma_E + \sigma_\eta$. Man erhält für den eindimensionalen Fall mit der elastischen Materialgleichung $\sigma_E = E \cdot \varepsilon$ und dem für das lineare viskose Konstitutivgesetz $\sigma_\eta = \eta \cdot \dot{\varepsilon}$ die von der Zeit abhängige Materialgleichung.

$$\sigma(t) = E \cdot \varepsilon(t) + \eta \cdot \dot{\varepsilon}(t) = E \cdot \left[\varepsilon(t) + \frac{\eta}{E} \cdot \dot{\varepsilon}(t) \right] = E \cdot [\varepsilon(t) + \tau \cdot \dot{\varepsilon}(t)] \quad (\text{Rel. 2-120})$$

Darin wird die Größe $\tau := \eta/E$ als Retardationszeit bezeichnet. Analog zur Regelungstechnik werden diese Feder-Dämpfer-Modelle durch gewöhnliche Differentialgleichungssysteme beschrieben, wobei das Verhalten dieser Modelle durch die sogenannte Sprungantwort charakterisiert wird.

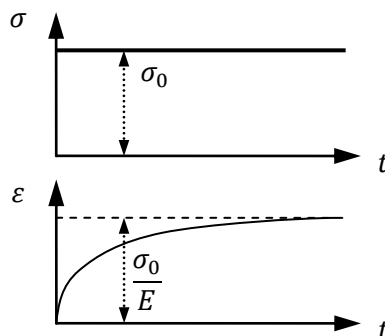


Bild 2-35: Transientes Verhalten eines Kelvin-Voigt-Materialmodells

Dabei bringt man am System eine äußere Last in Form eines Spannungssprunges σ_0 , der mathematisch durch eine Heavyside-Funktion darstellbar ist, auf, und misst bzw. berechnet das Antwortverhalten bezüglich der resultierenden Dehnung:

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0}{E} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right) \quad (\text{Rel. 2-121})$$

Daraus erhält man die Charakteristik für das Kelvin-Voigt-Modell, welche sogenanntes Kriechen – d.h. ein exponentiell abklingendes Anwachsen der Dehnung mit der Zeit – zeigt. Im Gleichgewichtszustand – d.h. für hinreichend große bzw. unendliche Zeit – wird die gesamte Spannung von der Feder aufgenommen (d.h.: $\varepsilon(t \rightarrow \infty) = \sigma_0/E$). Dieses Medium reagiert also zunächst ähnlich wie ein Fluid, hat aber dann ein Endverhalten wie ein Festkörper.

Eine dreidimensionale Verallgemeinerung dieses eindimensionalen Modells kann für große Deformationen bei isotropen Verhalten ebenfalls formuliert werden, wobei eine explizite Darstellung der Konstitutivgleichung für die gesuchten Spannungen möglich ist. Sie sei hier exemplarisch für die Ausgangskonfiguration angegeben (Truesdell & Noll, 1965), (Eringen, 1967):

$$S_{ij} = \frac{\lambda}{2} \cdot (J^2 - 1) \cdot C_{ij}^{-1} + \mu \cdot (\delta_{ij} - C_{ij}^{-1}) + J \cdot \eta \cdot C_{ik}^{-1} \cdot \dot{E}_{kl} \cdot C_{lj}^{-1} \quad (\text{Rel. 2-122})$$

$$\lambda = \frac{\nu \cdot E}{(1+\nu) \cdot (1-2 \cdot \nu)} \quad \mu = G = \frac{E}{2 \cdot (1+\nu)} \quad C_{ij} = F_{ki} \cdot F_{kj} \quad J = \det(F_{ij}) = \sqrt{\det(C_{ij})}$$

In oben stehender generalisierter Form beschreiben die ersten beiden Terme den elastischen Anteil der Materialgleichung, wobei diese durch hyperelastische Ansätze aus Abschnitt 2.3.1.1 ausgedrückt wurden. Der letzte Term beschreibt das viskose Werkstoffverhalten. Wird in dieser Materialgleichung der elastische Anteil zu null gesetzt, dann folgt für den auf die Momentankonfiguration bezogenen Cauchy'sche Spannungstensor die sehr einfache Beziehung

$$\sigma_{ij} = \eta \cdot d_{ij} \quad (\text{Rel. 2-123})$$

welche für konstante Spannung ein lineares Ansteigen der Dehnungen bzw. Verschiebungen aufweist und somit ein zähes kompressibles Fluid beschreibt.

Als nächstes wird kurz die sogenannte Relaxation dargestellt, welche im Wesentlichen durch eine zeitlich asymptotische Veränderung der Spannung bei einer vorgegebenen konstanten Dehnung definiert ist. Dieses Verhalten kann durch eine Reihenschaltung von Feder und Dämpfer im Kontext der Viskoelastizität eindimensional modelliert werden.

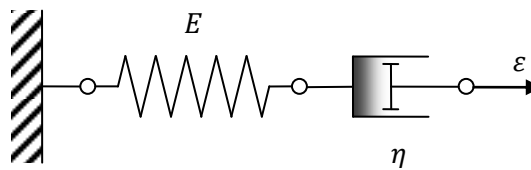


Bild 2-36: Elementares Materialmodell nach Maxwell

Es ist offensichtlich, dass beim eindimensionalen Modell die Spannung σ in Dämpfer und Feder gleich ist. Hingegen setzen sich die Dehnungen additiv zusammen ($\varepsilon = \varepsilon_E + \varepsilon_\eta$), woraus aus den Materialgleichungen der Feder ($\varepsilon_E = \sigma/E$) sowie des Dämpfers ($\dot{\varepsilon}_\eta = \sigma/\eta$) und einer Differentiation nach der Zeit ($\dot{\varepsilon}_E = \dot{\sigma}/E$, $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_E + \dot{\varepsilon}_\eta$) die das Gesamtsystem beschreibende gewöhnliche Differentialgleichung folgt:

$$E \cdot \dot{\varepsilon}(t) = \frac{\sigma(t)}{\hat{\tau}} + \sigma(t) \quad (\text{Rel. 2-124})$$

Darin wird die Größe $\hat{\tau} := \eta/E$ als Relaxationszeit bezeichnet. Analog zum Vorgehen beim Kriechvorgang wird die Sprungantwort zur Charakterisierung dieses Systems berechnet.

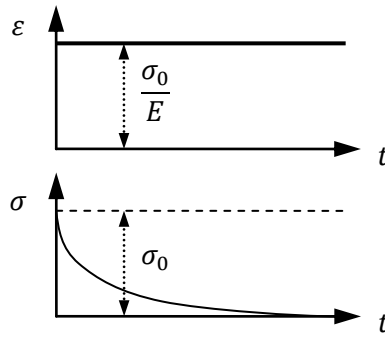


Bild 2-37: Transientes Verhalten eines elementaren Maxwell'schen Materialmodells

Dazu wird eine sprunghaft wirkende konstante Dehnung $\varepsilon_0 = \sigma_0/E$ aufgebracht und dann die Spannungsantwort berechnet:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{t}{\hat{\tau}}} \quad (\text{Rel. 2-125})$$

Aus der Lösung folgt, dass die Spannung relaxiert – d.h. vom Anfangswert $\sigma(t=0) = \sigma_0$ auf den Wert $\sigma(t \rightarrow \infty) = 0$ null absinkt. Da dieses Material keinen Festkörper beschreibt, muss das Maxwell-Modell durch eine Verallgemeinerung noch modifiziert werden, welche sich aus der Parallelschaltung einer zusätzlichen linearen Feder mit der Elastizitätskonstanten E^∞ ergibt.

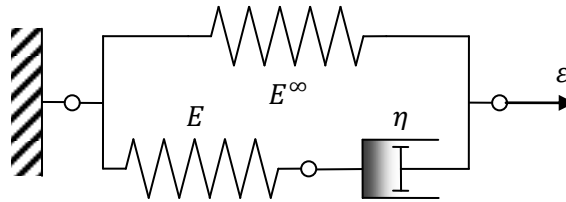


Bild 2-38: Modellierung viskoelastischer Eigenschaften von Festkörpern nach generalisierten Maxwell-Modell

Das modifizierte Materialmodell besitzt bei aufgebrachter konstanter Dehnung eine Spannungsantwort, die gegen einen positiven – von null verschiedenen – Grenzwert asymptotisch abklingt. Dieses Modell wird auch linearer Standardkörper genannt und kann durch ein gegenüber dem Maxwell'schen Modell leicht abgeändertes Differentialgleichungssystem beschrieben werden:

$$\sigma(t) = \sigma_M(t) + \sigma_E(t) \quad E \cdot \dot{\varepsilon}(t) = \frac{\sigma_M(t)}{\hat{\tau}} + \dot{\sigma}_M(t) \quad \sigma_E(t) = E^\infty \cdot \varepsilon(t) \quad (\text{Rel. 2-126})$$

In obigem Materialmodell (Rel. 2-126) stellt die Größe σ_M die Spannung im unteren Teil der Parallelschaltung des Standardkörpers, also dem Maxwell-Modell, dar. Analog dazu ist die Größe σ_E jene Spannung, die im oberen Teil der Parallelschaltung des Standardkörpers – also der zusätzlich eingeführten linearen Feder – wirkt.

Für die dreidimensionale Generalisierung des linearen Standardkörpers ist es wichtig zu erwähnen, dass die aus dem Produkt ermittelte Größe zwischen der Gesamtdehnungsgeschwindigkeit $\dot{\varepsilon}(t)$ und der Steifigkeit E des elastischen Materials, welches sich im unteren Teil des generalisierten Modells befindet, offensichtlich einer fiktiven transienten Spannungsänderung $\dot{\sigma}_{ME}(t)$ desselben durch E determinierten elastischen Mediums entspricht:

$$\frac{\sigma_M(t)}{\hat{\tau}} + \dot{\sigma}_M(t) = E \cdot \dot{\varepsilon}(t) =: \dot{\sigma}_{ME}(t) \Leftrightarrow \sigma_{ME}(t) = E \cdot \varepsilon(t) \quad (\text{Rel. 2-127})$$

Eine dreidimensionale Verallgemeinerung dieses eindimensionalen Modells kann für nichtlineare Kinetik unter zusätzlichen physikalischen Voraussetzungen bezüglich der Referenzkonfiguration formuliert werden. Dabei geht man davon aus, dass der viskose Anteil der Deformation nur infolge der deviatorischen Spannungs- und Verzerrungsgrößen hervorgerufen wird. Außerdem erfolgt eine Zerlegung

bzw. Aufspaltung des rein elastischen Spannungsanteils S_{ij}^∞ , welcher aus der parallelgeschalteten Feder (σ_E) resultiert, in einen deviatorischen (isochoren) $^{ISO}S_{ij}^\infty$ und volumetrischen $^{VOL}S_{ij}^\infty$ Anteil:

$$S_{ij}^\infty := ^{ISO}S_{ij}^\infty + ^{VOL}S_{ij}^\infty \quad (\text{Rel. 2-128})$$

Aus diesen beiden Aussagen ist es zweckmäßig, das gesamte Problem durch die in Abschnitt 2.1.1 eingeführten Größen zur Beschreibung der Zwangsbedingung bezüglich Erhaltung (deviatorisch; \hat{C}_{ij}) und Änderung (volumetrisch; J) des Volumens zu beschreiben (Rel. 2-16). Des Weiteren wird noch hyperelastisches Materialverhalten vorausgesetzt, wodurch die Verzerrungsenergiefunktion notwendig wird. Wegen der Zerlegung des hyperelastischen Spannungsanteils S_{ij}^∞ wird die Verzerrungsenergiefunktion $\hat{W}^\infty(\hat{C}_{ij}, J) := \hat{W}^\infty(\hat{C}_{ij}) + U^\infty(J)$ additiv in einen isochoren $\hat{W}^\infty(\hat{C}_{ij})$ und volumetrischen $U^\infty(J)$ Part aufgespalten:

$$^{ISO}S_{ij}^\infty = 2 \cdot \mathbb{K}_{ijab} \cdot \frac{\partial \hat{W}^\infty(\hat{C}_{kl})}{\partial \hat{C}_{ab}} \quad ^{VOL}S_{ij}^\infty = J \cdot C_{ij}^{-1} \cdot \frac{\partial U^\infty(J)}{\partial J} \quad (\text{Rel. 2-129})$$

$$\mathbb{K}_{ijab} := \frac{\partial \hat{C}_{ab}}{\partial C_{ij}} = J^{-\frac{2}{3}} \cdot \left(\mathbb{I}_{ijab} - \frac{1}{3} \cdot C_{ij}^{-1} \cdot C_{ab} \right) \quad \mathbb{I}_{ijab} := \frac{\partial C_{ab}}{\partial C_{ij}} = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{ia} \cdot \delta_{jb} + \delta_{ib} \cdot \delta_{ja}) \quad (\text{Rel. 2-130})$$

Für die fiktive elastische Spannung S_{ij}^{ME} bzw. deren zeitliche Änderung \dot{S}_{ij}^{ME} (Rel. 2-127), welche aus dem Maxwell'schen Modell resultiert, wird aufgrund der vorausgesetzten Hyperelastizität für die Verzerrungsenergiefunktion $\hat{W}(\hat{C}_{ij}, J) := \hat{W}(\hat{C}_{ij}) + U(J)$ eine äquivalente Aufspaltung in einen isochoren Anteil $\hat{W}(\hat{C}_{ij})$ (= deviatorisch inkompressibel) und volumetrischen Anteil $U(J)$ (= kompressibel) angenommen. Dabei verschwindet der volumetrischen Beitrag ($U(J) = 0$), da laut obigen Festlegungen die viskosen Deformationsanteile nur von deviatorischen Größen abhängen ($\hat{W}(\hat{C}_{ij}, J) := \hat{W}(\hat{C}_{ij}) = \hat{W}(\hat{C}_{ij})$). Dementsprechend kann die fiktive elastische Spannung bzw. deren transiente Änderung bezüglich der Ausgangskonfiguration einfach über die Annahmen aus Hyperelastizität dargestellt werden:

$$S_{ij}^{ME} = ^{ISO}S_{ij}^{ME} = 2 \cdot \mathbb{K}_{ijab} \cdot \frac{\partial \hat{W}(\hat{C}_{kl})}{\partial \hat{C}_{ab}} \Leftrightarrow \dot{S}_{ij}^{ME} = 2 \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left[\mathbb{K}_{ijab} \cdot \frac{\partial \hat{W}(\hat{C}_{kl})}{\partial \hat{C}_{ab}} \right] \quad (\text{Rel. 2-131})$$

Hiermit ist das auf die Ausgangskonfiguration bezogene gewöhnliche Differentialgleichungssystem zur Beschreibung viskoelastischer Eigenschaften (für Relaxationsverhalten) formulierbar:

$$\begin{aligned} S_{ij} &= S_{ij}^M + ^{ISO}S_{ij}^\infty + ^{VOL}S_{ij}^\infty = S_{ij}^M + S_{ij}^\infty \\ \dot{S}_{ij}^M + \frac{1}{\tau} \cdot S_{ij}^M &= 2 \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left[\mathbb{K}_{ijab} \cdot \frac{\partial \hat{W}(\hat{C}_{kl})}{\partial \hat{C}_{ab}} \right] = \dot{S}_{ij}^{ME} \\ ^{ISO}S_{ij}^\infty &= 2 \cdot \mathbb{K}_{ijab} \cdot \frac{\partial \hat{W}^\infty(\hat{C}_{kl})}{\partial \hat{C}_{ab}} \\ ^{VOL}S_{ij}^\infty &= J \cdot C_{ij}^{-1} \cdot \frac{\partial U^\infty(J)}{\partial J} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-132})$$

Dabei sind die weiteren Tensoren bezüglich der freien Verzerrungsenergiefunktionen aus dem volumetrisch-isochoren Split der Hyperelastizität elementar bestimmbar. Sie sind hier jedoch nicht im Detail genauer spezifiziert, da hierfür explizite Angaben für entsprechende Werkstoffklassen wie Polymere oder ähnlich Kunststoffe notwendig sind.

Dieser verallgemeinerte Ansatz für finite Deformationen wurde in den 1980ern in der Literatur vorgestellt (Simo, 1987) und ist nur eine von vielen Modellierungsmöglichkeiten, welche jedoch alle wesentlichen Aspekte in einfacher sowie zugänglicher Weise aufzeigt. Allerdings ist in diesem Modell nur die Kinematik der Gesamtverzerrung als nichtlineare Größe berücksichtigt. Im Rahmen einer noch weiter generalisierten nichtlinearen Viskoelastizität müssen die Verformungen mittels des Deformationsgradienten multiplikativ in einen rein elastischen und einen rein viskosen inelastischen Anteil zerlegt werden (Reese & Govindjee, 1998). Zusätzlich kommt noch die Möglichkeit hinzu, eine nichtlineare Abhängigkeit der Viskosität von der Deformationsgeschwindigkeit zu berücksichtigen.

Als weitere wichtige Materialeigenschaft wird nun noch die Viskoplastizität beschrieben, wobei ein Modell dieses Typs sich durch Gleichungen darstellen lässt, deren Charakteristik nachfolgend beschriebene wesentliche Eigenschaften aufweisen:

- Für eine gegebene Belastungsvorgabe resultiert zu jedem Zeitpunkt eine Materialantwort in Abhängigkeit eben dieser Belastungsgeschichte sowie insbesondere von der sich einstellenden Deformationsgeschwindigkeit.
- Für unendlich langsam ablaufende Belastungen bzw. Materiepartikelbewegungen reduziert sich die konstitutive Beziehung für die Spannung auf diejenige für die Gleichgewichtsspannung, welche in diesem Fall durch ein Funktional vom Plastizitätstyp dargestellt ist.

Um ein analoges Vorgehen zu den viskosen Materialeigenschaften fester Körper anzuwenden, kommt zu Beginn wieder ein eindimensionales (rheologisches) Modell zur Anwendung, welches im Anschluss unter Zuhilfenahme der ratenunabhängigen Plastizität (vgl. Abschnitt 2.3.1.2) auf den dreidimensionalen Fall verallgemeinert wird. Für einen vollständigen und nachvollziehbareren Zugang werden einleitend ein elastisch-idealplastisches (siehe Bild 2-39 links) sowie ein isotrop verfestigendes elastoplastisches (siehe Bild 2-39 rechts) eindimensionales (rheologisches) Materialmodell unter Verwendung eines die rein plastischen Eigenschaften erfassenden Reibelements dargestellt. Diese beiden Modelle sind lediglich Spezialfälle zu dem in Abschnitt 2.3.1.2 „Plastizität“ angeführten Gleichungssystem bezüglich deformationsgeschwindigkeitsunabhängiger Eigenschaften.

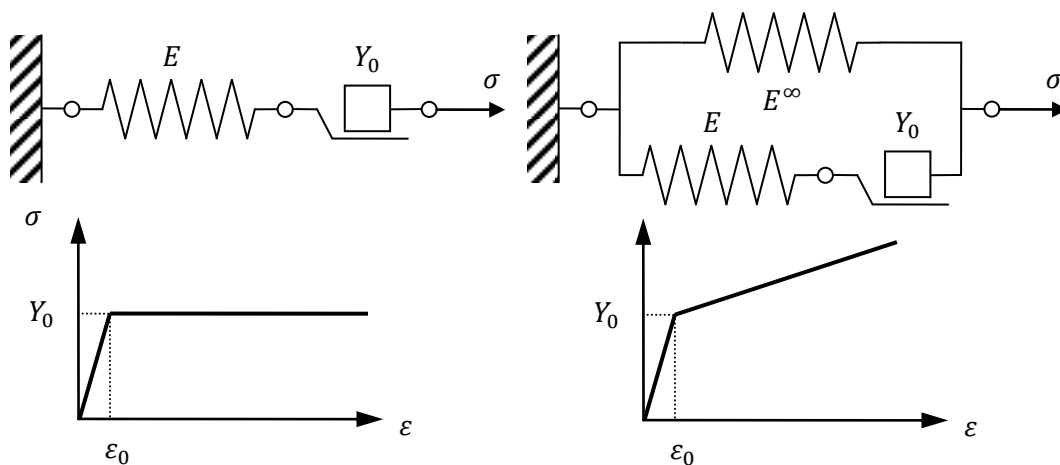


Bild 2-39: Materialmodelle elastisch-idealplastisch (l) und elastisch – plastisch mit lin. Isotroper Verfestigung (r)

Aus diesen elastisch-plastischen Modellen kann mit einem zusätzlichen, dem Reibungselement parallelgeschalteten, linearen (geschwindigkeitsproportionalen) Dämpfungselement unter Entfernung der linear elastischen Feder(n) rein viskoplastisches (siehe Bild 2-40 links) Materialverhalten dargestellt werden, wobei das daraus resultierende Medium ein Fluid und kein Festkörper ist. Deshalb muss diesem nach Bingham benannten Modell wie beim Standardkörper eine weitere lineare Elastizitätseigenschaft in Form einer Feder hinzugefügt werden. Hieraus geht elasto-viskoplastisches (siehe Bild 2-40 rechts) Materialverhalten hervor, welches im Folgenden genauer dargestellt sowie generalisiert wird.

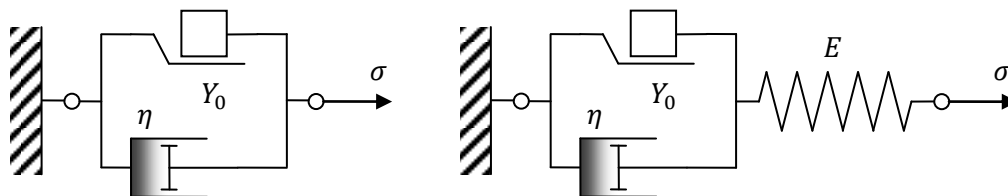


Bild 2-40: Materialmodelle nach Bingham viskoplastisch (l) und elasto – viskoplastisch (r)

Aus den Gleichgewichtsbeziehungen folgend, reagiert das elementare elasto-viskoplastische Modell bzw. der Bingham-Körper (Bild 2-40 rechts) solange elastisch, bis die Fließspannung Y_0 im Reibelement überschritten wird: $|\sigma| \geq Y_0$, wobei der Betrag über die Spannungen sowohl Zug- als auch Druckbelastungen gleichermaßen erfasst. Falls die Fließspannung erreicht oder sogar überschritten wird, tritt plastisches Fließen in Kombination mit transientem ratenabhängigem Effekt infolge des viskosen Dämpfers

auf und man erhält mit den bereits definierten Bezeichnungen sowie der viskoplastischen Dehnungs- bzw. Verzerrungsgeschwindigkeit $\dot{\varepsilon}_{VP}$, die auch als Dehnungsrate bezeichnet wird, die Gleichung:

$$\sigma = Y_0 + \eta \cdot \dot{\varepsilon}_{VP} = E \cdot \varepsilon_E \Leftrightarrow \dot{\varepsilon}_{VP} = \frac{1}{\eta} \cdot (\sigma - Y_0) \quad (\text{Rel. 2-133})$$

Man sieht, dass die viskoplastische Verzerrungsgeschwindigkeit von der Differenz zwischen der anliegenden Spannung und der Fließspannung abhängt. Die Differenz $(\sigma - Y_0)$ bezeichnet man als Überspannung. Ist keine Fließgrenze vorhanden ($Y_0 = 0$), dann reduziert sich das Materialverhalten auf das des Maxwell'schen Modells. Weil nach obigem Modell Aufbau die rein elastischen ε_E und rein viskoplastischen ε_{VP} Verzerrungen sich additiv ($\varepsilon = \varepsilon_E + \varepsilon_{VP}$) aufspalten, kann daraus die eindimensionale Materialgleichung für elastisch-viskoplastisches Verhalten angegeben werden, worin durch den Gebrauch des Föppl-Symbols ($\langle x \rangle := 1/2 \cdot (x + |x|)$), die viskosen plastischen Eigenschaften nur bei Überschreitung der Fließspannung wirken, da nach Abschnitt 2.3.1.2 bei Plastifizierung stets eine Grenzspannung Y_0 zu überschreiten ist:

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_E + \dot{\varepsilon}_{VP} = \frac{\dot{\sigma}}{E} + \frac{1}{\eta} \cdot (\sigma - Y_0) \Leftrightarrow E \cdot \dot{\varepsilon} = \dot{\sigma} + \frac{1}{\tau} \cdot \langle \sigma - Y_0 \rangle \quad (\text{Rel. 2-134})$$

In obiger Gleichung (Rel. 2-134) ist wiederum eine charakteristische Zeit τ definiert ($\tau := \eta/E$) worden, welche die viskosen Eigenschaften des Gesamtsystems charakterisiert.

Eine dreidimensionale Verallgemeinerung dieses Materialmodells erfolgt unter Annahme kleiner Deformationen, bei welchen die totalen Dehnungsgrößen in rein elastische und rein plastische Beiträge additiv zerlegbar angenommen werden. Für die Einführung der allgemein gültigen elasto-viskoplastischen Gleichungen werden Analogien zur ratenunabhängigen Elastoplastizität in Abschnitt 2.3.1.2 verwendet, da nur die zusätzliche Abhängigkeit von der Deformationsgeschwindigkeit hinzukommt. Zum Unterschied zur klassischen Plastizität, bei welcher ausschließlich plastische Spannungszustände zulässig sind, die exakt auf der Fließ- bzw. Verfestigungsfläche liegen, sind im Kontext viskoplastischer Modelle auch Spannungszustände außerhalb der Fließfläche erlaubt, was durch die transiente Evolutionsgleichung (Rel. 2-133) der plastischen Dehnung in Abhängigkeit der Überspannung zum Ausdruck kommt. Im Gegensatz dazu muss bei ratenunabhängiger Elastoplastizität die Einhaltung der Restriktion, dass plastische Spannungszustände ausschließlich auf der Fließfläche liegen dürfen, durch die Einführung eines weiteren Freiheitsgrades λ sowie der Äquivalenzrelation (Rel. 2-114) beschrieben werden. Die Struktur dieser zusätzlichen Gleichung (Rel. 2-114) legt die Interpretation nahe, dass die Ableitung der Fließfläche $\hat{f}(s_{mn}, q_{kl})$ nach den Spannungen s_{ij} bzw. Verfestigungsvariablen q_{kl} Richtungen beschreiben. Die ist mathematisch dadurch begründbar, dass die Ableitung einer skalaren flächenbeschreibenden Funktion nach seinen unabhängigen Größen Normalvektoren auf die Fläche darstellen. Der Konsistenzparameter λ , welcher die Lage des Deformationszustandes auf der Fließfläche erzwingt, ist bei viskoplastischen Modellen nicht mehr notwendig, da auch Überspannungen außerhalb der Fließfläche zulässig sind. Aus diesen Überlegungen kann über analoge Zuordnungen bezüglich Richtung und Konsistenzparameter zum klassischen dreidimensionalen Elasto-Plastizitätsmodell sowie zum eindimensionalen elasto-viskoplastischen Verhalten (Rel. 2-133) eine dreidimensionale Generalisierung der ratenabhängigen Plastizität in einheitlicher Darstellung angegeben werden (Simo, 1999). Die Richtung n_{ij}^{VP} wird demnach durch die Überspannung, welche durch die Differenz zwischen aktueller Spannung s_{ij} (vgl. 1dim. σ) und der Projektion dieser Spannung s_{ij} auf die Fließfläche s_{ij}^* (vgl. 1dim. Y_0) gegeben ist, ersetzt, wobei die Projektionsvorschrift im Allgemeinen beliebig sein kann. Für den Spezialfall einer Normalprojektion kann die Richtung der Überspannung $n_{ij}^{VP} \triangleq s_{ij} - s_{ij}^*$ durch die Fließflächennormalrichtung $n_{ij}^{VP} \triangleq \partial \hat{f}(s_{mn}, q_{kl}) / \partial s_{ij}$ bzw. $\dot{n}_{ij}^{VP} \triangleq \partial \hat{f}(s_{mn}, q_{kl}) / \partial q_{ij}$ ersetzt werden. Die Substitution des Konsistenzparameters λ erfolgt über die Viskosität sowie eine mit dieser Größe multiplikativ verknüpfte Funktion ϕ , um eine bessere Anpassung an Versuchsdaten zu gewährleisten; dabei ist die Funktion $\phi = \hat{\phi}(\hat{f}(s_{mn}, q_{kl}))$ wiederum von der normierten Fließfunktion $\bar{f} = \hat{f}(s_{mn}, q_{kl})$ abhängig:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{VP} = \lambda_{VP} \cdot n_{ij}^{VP} \Leftrightarrow \dot{\varepsilon}_{ij}^{VP} = \frac{1}{2 \cdot \eta} \cdot \langle \hat{\phi}(\hat{f}(s_{mn}, q_{kl})) \rangle \cdot (s_{ij} - s_{ij}^*) \quad (\text{Rel. 2-135})$$

Ohne näher darauf einzugehen sind für dynamische Belastungen metallischer Werkstoffe Potenzansätze $\phi := \hat{f}^m(s_{ab}, q_{kl})$ sowie exponentielle Funktionen $\phi := e^{\hat{f}(s_{ab}, q_{kl})} - 1$ oft verwendete Modelle. Zusätzlich ist noch das elastische Materialverhalten mit den zugehörigen linearisierten elastischen Deh-

nungen $\varepsilon_{ij}^E = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{VP}$ zu erfüllen, womit das Gleichungssystem für elasto-viskoplastisches Werkstoffverhalten vollständig definiert ist.

Damit sind die Konzepte zur Modellierung viskoser – d.h. verzerrungsgeschwindigkeitsabhängiger – Materialeigenschaften dargestellt. Der Grund weshalb dieser Abschnitt ausführlicher behandelt wurde, liegt in der Modellierung von Riss- und Schädigungsentwicklung (Abschnitt 2.5.1), welche auf der Verwendung eines viskosen Ansatzes basiert, dessen grundlegendes Konzept dem in diesem Abschnitt beschriebenen entspricht. In dieser Arbeit ist das Versagensverhalten (siehe Abschnitt 2.5) mittels diskreter Beschreibungsansätze abgebildet, wobei die hierfür verwendeten Kohäsivzonenelemente die Schädigungsevolution durch eine konstitutive Formulierung beschrieben, welche durch das Traction Separation Law (kurz TSL) gegeben ist. Diese Schädigungsevolution kann mit oder ohne viskose Eigenschaften modelliert werden und weist durch seinen degenerierenden (versagenden) Charakter entfestigendes Verhalten bezüglich des Gesamtsystems auf. Die Modellierung entfestigender Eigenschaften kann auf das aus der Finiten Element Methode (FEM) resultierende sowie zu lösende nichtlineare Gleichungssystem negative Auswirkungen bezüglich Konvergenzverhalten besitzen und führt je nach Problemfall sogar zur Divergenz. Viskose Eigenschaften haben auf Gleichungssysteme dieses Typs grundsätzlich regularisierende und somit auf die Konvergenz positive Wirkung. Deshalb wurden bei den in dieser Arbeit angeführten Beispielen bezüglich Versagensverhalten während Nanoindentation (siehe Abschnitt 5.2) für das Konstitutivgesetz zur Beschreibung von Rissen viskose Eigenschaften eingebettet. Die daraus resultierende Geschwindigkeitsabhängigkeit, die nur zwecks Konvergenzverbesserung eingebaut werden musste, erfordert bei der Wahl der entsprechenden Parameter besondere Sorgfalt. Deshalb sind die Parameter, welche die Viskositätseigenschaften quantifizieren, gerade so worden, dass kaum eine Abhängigkeit von den Deformationsgeschwindigkeiten auftritt, aber dennoch eine ausreichend regularisierende Auswirkung auf die Schädigungsinitiierung sowie Evolution der modellierten Risse vorhanden ist.

2.3.2 Nichtlokale Modellbildung

Nichtlokale Theorien stellen eine systematische Erweiterung der lokalen Theorien dar, bei welchen der Zustand eines materiellen Punktes nur von dessen Ort (Koordinaten) X_i sowie seiner – in die Vergangenheit gerichteten – Zustandsgeschichte abhängt. Wegen der Kausalität kann der Zusammenhang mit der Zustandsgeschichte nur von vergangenen, nicht jedoch von zukünftigen Bewegungen abhängen. Wie bereits erwähnt, ist bei nichtlokalen Modellen die systematische Erweiterung durch Miteinbeziehung der Abhängigkeit des Zustandes eines materiellen Punktes von seiner Nachbarschaft gegeben. Die materiellen Punkte der Nachbarschaft müssen natürlich auch zum Körper gehören, wobei deren Zustände wiederum von anderen diesen Partikel zugeordneten Punkten sowie deren Zustandsgeschichte abhängen. Die Gründe, weshalb nichtlokale Theorien eingeführt worden sind, haben sich aus unterschiedlichen Notwendigkeiten heraus entwickelt.

Ein materialwissenschaftlicher Ausgangspunkt liegt im Vorhandensein von kleinsten Bausteinen (bspw. Nanopartikel in Kompositwerkstoffen etc.) in einer heterogenen Mikrostruktur, welche bei Deformationsprozessen Eigenrotationen durchführen können, ohne dabei durch translatorische Bewegungen ihren räumlichen Ort zu verändern. Dadurch können makroskopische Phänomene durch mikrostrukturelle Eigenschaften erklärt werden. Bei einer Modellierung im Rahmen der Kontinuumsmechanik ist es daher naheliegend, jedem materiellen Punkt ein drehbares Mikrokontinuum zuzuordnen, wodurch eine Miteinbeziehung der Nachbarschaft und somit eine nichtlokale Theorie resultiert. Deshalb ist es notwendig, für eine quantitative Beschreibung dieses phänomenologischen Ansatzes, neben den üblichen translatorischen, weitere rotatorische Freiheitsgrade einzuführen. Hierfür sind die klassischen Standardfeldtheorien zu erweitern bzw. zusätzlich konstitutive Gleichungen bezüglich der Drehfreiheitsgrade festzulegen (siehe Abschnitt 2.3.2.2).

Ein anderer Ursprung nichtlokaler Materialmodelle ist im Verhalten der beschreibenden Differentialgleichungssysteme von Festkörpern bezüglich entfestigenden Materialverhaltens gegeben. Das entfestigende Verhalten steht im Gegensatz zur Verfestigung, wobei der letztgenannte Begriff die Zunahme der mechanischen Festigkeit eines Werkstoffs durch (bspw. plastische) größer werdende Verformung bezeichnet. Analog definiert man die Abnahme der mechanischen Festigkeit bei steigender Deformation als Entfestigung. Somit steht eine Entfestigung mit mikrostrukturellen Schädigungsmechanismen im direkten Zusammenhang, da Risse bzw. Porenbildung oder anderes degenerativ beeinflussendes Verhalten (z.B. Kavitation) den Werkstoff in seiner inneren Struktur schwächt. Zum prinzipiellen Verständnis der physikalisch-mathematischen Zusammenhänge wird im Folgenden das idealisierte eindimensionale Modell eines einseitig eingespannten und quasistatisch belasteten Zugstab verwendet.

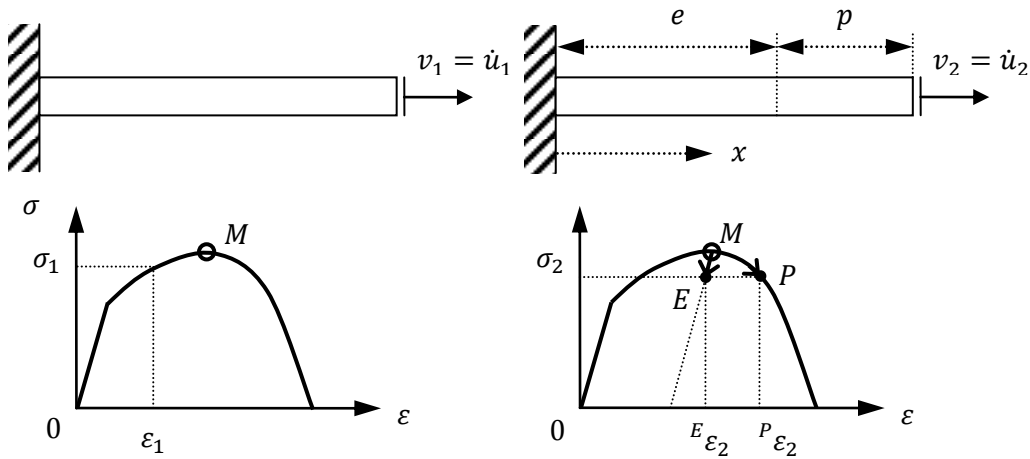


Bild 2-41: Elementares Modell zur Lokalisierung bei elastisch-plastischem Materialverhalten

Wird der Stab vom Initialzustand 0 bis zur Spannung σ_1 streng monoton steigend belastet, so ist der Zusammenhang zwischen Dehnung und Spannung eindeutig bzw. umkehrbar. Außerdem weist das Material verfestigendes Verhalten auf, was sich in diesem eindimensionalen Modell durch eine positive Steigung quantifizieren lässt (Bild 2-41 links unten). Das Material kann bei Belastungssteigerung mit einem erhöhten inneren Widerstand reagieren. Durchläuft die Belastungssteigerung den Punkt M, so treten ab diesem Zustand bei weiterer monotoner Dehnungszunahme entfestigende Eigenschaften auf, was sich durch ein Absinken der Spannung bei weiterer Verlängerung des Stabes bemerkbar macht, wodurch eine negative Steigung auftritt. Nun kann das Material nicht mehr durch Erhöhung des inneren Widerstandes reagieren und die Spannung sinkt durch die im Material weit fortgeschrittene innere Schädigung bei weiterer Stabverlängerung ab. Dabei ist es möglich, die durch Dehnungssteigerung resultierende Spannungserniedrigung entweder dem linear-elastischen oder aber dem plastischen Materialverhalten zuzuordnen, woraus kein eindeutiger Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung mehr folgt (Bild 2-41 rechts unten). Grundsätzlich werden sich Teile des Stabes elastisch und andere Bereiche plastisch entlasten. Modellhaft soll nun angenommen werden, dass ein zusammenhängender Bereich der Länge e sich elastisch und ein zweiter ebenfalls zusammenhängender Teil p sich plastisch verhält (Bild 2-41 rechts oben). Die Frage ist nun, wie groß in einem Modell dieses Typs die einzelnen Bereiche sind? Aussagen bezüglich dieser Problemstellung können über energetische Betrachtungen gemacht werden, worauf aber im Detail in dieser Arbeit nicht eingegangen wird. Aus diesen energetischen Ansätzen folgt, dass eine unendlich dünne, sich plastisch deformierende Zone die gesamte von außen aufgebrachte Deformation aufnimmt. Dieses rein aus der physikalisch-mathematischen Modellierung folgende Phänomen wird als Lokalisierung bezeichnet. Lokalisierungsphänomene treten in der Realität zum Beispiel in Form von Scherbändern oder Rissen auf. Diese sind aber immer mit endlichem, d.h. von null verschiedenem, plastischem Arbeitsaufwand verbunden. Das Versagen in verschwindendem Volumen widerspricht dem physikalischen Verständnis und den experimentellen Befunden. Eine weitere, wenn auch mathematische Konsequenz ist aus einer modifizierten Form der Wellengleichung ableitbar, welche aus der Impulsbilanz sowie der Kinematik und dem Materialgesetz folgt. Im Fall von Zustandsänderungen, die aus Elastoplastizität resultieren, sind Konstitutivgesetze in ihrer allgemeinen Form meist nur inkrementell darstellbar, wobei im Folgenden räumliche Bereiche mit konstantem Materialverhalten angenommen werden. Aus diesem Grund ist es zweckmäßig, die Wellengleichung durch transiente Differentiation in eine Form zu bringen, die für Plastizitätsmodelle geeigneter ist:

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\rho}{E^{VP}} \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - c^2 \cdot \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = 0 \quad \text{mit} \quad c := \sqrt{\frac{\rho}{E^{VP}}} \quad (\text{Rel. 2-136})$$

Störungen breiten sich nach der modifizierten Wellengleichung (Rel. 2-136) mit der sogenannten Wellenausbreitungsgeschwindigkeit c aus, wobei E^{VP} die Tangenten zu den in Bild 2-41 dargestellten Spannungs-Dehnungskurven, welche auch als tangentielle elastoplastische Steifigkeiten bezeichnet werden. Tritt Verfestigung auf, so besitzt die Tangente ($E^{VP} > 0$) eine positive Steigung und die Differentialgleichung hat wegen der reellen Wellenausbreitungsgeschwindigkeit c hyperbolischen Charakter. Tritt hingegen Entfestigung auf, hat die Tangente ($E^{VP} < 0$) eine negative Steigung und die Differentialgleichung hat wegen der komplexwertigen Wellenausbreitungsgeschwindigkeit c elliptische Eigenschaf-

ten. Beide partielle Differentialgleichungstypen – d.h. sowohl hyperbolisch als auch elliptisch – stellen Anfangsrandwertprobleme bezüglich Zeit bzw. Ort dar und besitzen völlig andere Lösungscharakteristiken. Im Kontext von quasistatischen Randwertproblemen tritt analog dazu eine ähnliche Problemstellung auf, wobei hier das beschreibende Differentialgleichungssystem grundsätzlich elliptisch ist und durch entfestigendes Materialverhalten seine ursprüngliche (elliptische) Charakteristik verliert, was wiederum zu einem entsprechenden Typwechsel der Gleichungen führt. Somit kann festgehalten werden, dass der Typwechsel in den beschreibenden Gleichungssystemen der Strukturmechanik zu Lokalisierungsphänomenen führt. Eine dreidimensionale Erweiterung des Phänomens der Lokalisierung erfolgt über den Tangentenmodul \mathbb{D}_{ijkl} , der die momentan wirkenden Steifigkeiten des Materialverhaltens im verallgemeinerten Spannungs-Dehnungsraum festlegt. Dieses Verfahren sei an dieser Stelle nur prinzipiell und ohne weitere Begründung angegeben:

$$\mathbb{D}_{ijkl} := \frac{\partial S_{ik}}{\partial E_{lj}} \Rightarrow Q_{ij} := n_k \cdot \mathbb{D}_{ijkl} \cdot n_l \Rightarrow d := \det(Q_{ij}) \quad (\text{Rel. 2-137})$$

Daraus kann mit Hilfe eines beliebigen Flächennormalvektors n_k der sogenannte Akustiktensor Q_{ij} bestimmt werden. Ist die Determinante d dieses Akustiktensors Q_{ij} für eine beliebige Richtung n_k kleiner oder gleich Null, dann ist dadurch die ortsabhängige Lage der Fläche (Tangentialebene) bezüglich der Lokalisierungszone im betrachteten materiellen Punkt bestimmt. Diese Herangehensweise stellt für eine numerische Ermittlung von Lokalisierungszone im Rahmen eines FEM-Postprocessings einen sehr großen Rechenaufwand dar, weil die räumliche Orientierung von n_k unbekannt ist und deshalb bezüglich aller möglichen Richtungen gesucht werden muss. Erwähnt sei noch, dass eine exakte Analyse der Lokalisierungsproblematik mit dem materiellem Stabilitätsverhalten eng verbunden ist, wobei hier auf die Literatur verwiesen sei (Bazant & Pijaudier-Cabot, 1988), (Ottosen & Runesson, 1991), (Krawietz, 1986), (Ogden, 1984).

Bei transsonischen Strömungen treten äquivalente Probleme auf, wenn nämlich die lokalen Strömungsgeschwindigkeiten die Schallgeschwindigkeit erreichen und in Folge dadurch den Typ der Navier-Stokes-Gleichungen von elliptisch (reine Unterschallströmung) zu hyperbolisch (reine Überschallströmung) ändern.

Um diese rein mathematischen Phänomene zu vermeiden, muss die kontinuumsmechanische Beschreibung entfestigender Materialien erweitert (regularisiert) werden. Hierfür kann man nichtlokale Materialmodelle verwenden auf welche in diesem Abschnitt etwas genauer eingegangen wird. Eine andere bereits in Abschnitt 2.3.1.3 beschriebene Behandlungsweise ist die Miteinbeziehung von viskosen Eigenschaften beim Materialverhalten fester Körper. Diese Methode ist aber nur bedingt geeignet, da hierdurch das Werkstoffverhalten von der Belastungsgeschwindigkeit bzw. von den Verzerrungsgeschwindigkeiten abhängig ist, was nicht immer erwünscht ist oder abgebildet werden soll. In diesem Fall kann man sich damit helfen, die Viskosität so klein wie möglich zu halten, um einerseits ausreichende Regularisierungsauswirkungen und andererseits keine allzu große Lösungsabhängigkeit von den Deformationsgeschwindigkeiten zu erhalten.

Für die Verwendung von nichtlokalen Theorien werden im Folgenden einige generalisierte teilweise etwas abstrakte Betrachtungsweisen und Ansätze vorgestellt, die in weiterer Folge zur Klassifikation verschiedener erweiterter kontinuumsmechanischer Theorien jedoch sehr gut verwendbar sind. Zu Beginn sind einige aus der Anschauung nachvollziehbare Festlegungen zu machen.

- Prinzipiell kann festgehalten werden, dass die Deformationen durch die Bewegungen x_i (Rel. 2-2) der entsprechen Materiepartikel unmittelbar beschrieben sind (Rel. 2-12).
- Desweiteren ist durch die Bewegung x_i aller materiellen Punkte Y_j des Körpers \mathfrak{K} die wesentliche Ursache für den momentanen, über das Konstitutivgesetz zu beschreibenden, mechanischen Zustand der Materiepartikel axiomatisch gegeben.
- Zusätzlich wird die Zeit t als skalarer Parameter eingeführt, welcher den momentanen Zustand über einen postulierten kausalen Zusammenhang beeinflusst. Dies bedeutet, dass alle Bewegungen, die sämtliche materiellen Punkte in der Vergangenheit angenommen haben, sich auf den derzeitigen Zustand der Materiepartikel auswirken.

Aus diesen Ausführungen folgend wird ein mathematischer Zusammenhang definiert, welcher aus der den Zustand beschreibenden tensorwertigen Größe S_{ij} jener Materiepartikel mit den Koordinaten X_k sowie allen in der vergangenen Zeit t angenommenen Bewegungszuständen x_i sämtlicher materiellen Punkte mit den Koordinaten Y_l des Körpers \mathfrak{K} besteht. Für diesen Zusammenhang ist die Verwendung

von Funktionalen zweckmäßig, wobei betont sei, dass hier Zusammenhänge nicht streng mathematisch, sondern nur elementar skizzierend dargestellt werden. Funktionale sind Funktionen, deren Argumente wiederum Funktionen sind und die durch komplexe mathematische Vorschriften, wie beispielsweise einer Integration oder ähnlichen Operationen (Differentiation, Differential-, Integral- oder algebraische Gleichungen bzw. Kombinationen dieser Äquivalenzrelationen, etc.), je nach Darstellung und Gebrauch auch ganze Gebiete von Punkt- und/oder Funktionenmengen abbilden können. Somit können Funktionale als eine Verallgemeinerung von Funktionen gesehen werden, wobei die Abbildungen selbst sowie auch deren Argumente tensorwertige Größen beliebiger Stufe sein können. Dementsprechend muss ein Funktional nicht zwingenderweise immer einen skalaren Wert als seine Abbildung besitzen. Für eine weitere Darstellung von Funktionalen und deren Analysis sei auf die weiterführende Literatur verwiesen.

Aus den eben beschriebenen Axiomen bezüglich der Darstellung eines Zustandes kann eine Materialgleichung bzw. konstitutive Vorschrift physikalisch motiviert sowie mathematisch abstrakt mittels des tensorwertigen Funktional \mathcal{F}_{ij} definiert werden:

$$S_{ij} := \tilde{\mathcal{F}}_{ij}^{Y_l \in \mathcal{K}} [\hat{x}_k(Y_l, s), X_m] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-138})$$

Nach dem Kausalitätsprinzip ist einerseits die Ursache durch alle vergangenen ($-\infty < s < t$) Bewegungen x_k aus der Gesamtheit aller materiellen Punkte (Koordinaten Y_l) des Körpers \mathcal{K} , sowie andererseits die Wirkung mit dem zur Zeit t vorliegende Spannungszustand S_{ij} der zu beschreibenden Materiepartikel (Koordinaten X_m) gegeben. Mit Hilfe dieser sehr allgemeinen Darstellung eines Materialgesetzes können fast alle in der Literatur behandelten Materialien in ihrem Verhalten modelliert und durch weitere Umformungen systematisch eingeordnet werden, was für einen Überblick in der Flut von publizierten Konstitutivgesetzen sehr hilfreich sein kann.

Im Kontext der unterschiedlichen Möglichkeiten zur Abbildung von Punktbewegungen kann der bisher verwendete Ausgangspunkt (Rel. 2-2) (Rel. 2-4) als spezielle Darstellung im Rahmen eines allgemeinen Ansatzes zur Beschreibung der Materiepartikel angesehen werden. Erfolgt nämlich eine Entwicklung der Bewegung des Kontinuums in eine Taylorsche Reihe, so sind daraus generalisierte Konzepte zur Darstellung von konstitutiven Beziehungen in einheitlicher Weise möglich. Dieser Ansatz zur Darstellung der Konstitutivgleichungen soll im Folgenden genauer beschrieben werden.

2.3.2.1 Modelle mit höheren Gradienten

Einleitend soll eine Verbindung zwischen der allgemeinst möglichen Darstellungsform des (Spannungs-) Zustandes (Rel. 2-138) und den konstitutiven Beziehungen lokaler Kontinua aus Abschnitt 2.3.1 aufgezeigt werden.

Um die Spannungen in einem „einfachen“ bzw. lokalen Kontinuum auszudrücken, ist in den letzten Unterabschnitten von 2.3.1 jeweils nur der Verzerrungstensor E_{kl} herangezogen worden, was wiederum impliziert, dass ausschließlich Gradienten erster Ordnung in den beschreibenden Gleichungen von materiellen Punkten Verwendung finden. Zusätzlich können auch Zeitabhängigkeiten hinzukommen, welche viskoses oder belastungsgeschichtsabhängige Eigenschaften beschreiben.

Für die Quantifizierung der Verformungen ist der Deformationsgradient (Rel. 2-4) die zentrale Größe. Dieser kann neben dem in Abschnitt 2.1.1 eingeführten Zugang mit Hilfe des totalen Differentials auch durch einen alternativen verallgemeinerten Ansatz abgeleitet werden. Dabei wird die Bewegung des Punktes für einen festen Zeitpunkt t in eine Taylorreihe entwickelt,

$$\hat{x}_i(Y_l, t) = \hat{x}_i(X_l, t) + \frac{\partial \hat{x}_i(X_l, t)}{\partial X_j} \cdot (Y_j - X_j) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \hat{x}_i(X_l, t)}{\partial X_j \partial X_k} \cdot (Y_j - X_j) \cdot (Y_k - X_k) + \dots \quad (\text{Rel. 2-139})$$

womit der Deformationsgradient als Gradient erster Ordnung und weitere Gradienten höherer Ordnungen in die Beschreibung eingeführt werden:

$$F_{ij} := {}^1F_{ij} := {}^1\hat{F}_{ij}(X_l, t) := \frac{\partial \hat{x}_i(X_l, t)}{\partial X_j} \quad {}^2F_{ij} := {}^2\hat{F}_{ijk}(X_l, t) := \frac{\partial^2 \hat{x}_i(X_l, t)}{\partial X_j \partial X_k} = \frac{\partial {}^1\hat{F}_{ij}(X_l, t)}{\partial X_k} \quad (\text{Rel. 2-140})$$

Durch die Taylorreihenentwicklung (Rel. 2-139) sind die Bewegungen aller Punkte Y_j in der Nachbarschaft eines beliebigen Punktes X_j approximativ dargestellt, wobei als Entwicklungspunkt der Potenzreihe der Punkt X_j verwendet wird, auf dem sich die betrachtete Nachbarschaft Y_j bezieht. Geht man davon aus, dass die Bewegung des Punktes X_j , der die Nachbarschaftspunkte Y_j determiniert, durch

genau diese Umgebung nicht oder nur vernachlässigbar gering beeinflusst wird, ist die Taylorreihendarstellung (Rel. 2-139) für interagierende materielle Punkte vereinfachend darstellbar. Die gegenseitige Beeinflussung der Bewegung materieller Punkte kann physikalisch anschaulich durch Wechselwirkungskräfte begründet werden, wobei die Vernachlässigung der nachbarschaftlichen Beeinflussung durch ein räumlich stark abklingendes Verhalten dieser Wechselwirkungskräfte legitimierbar ist! Daraus resultierend kann die Menge aller nachbarschaftlichen Punkte Y_j durch jenen zentralen Punkt X_j ersetzt werden, der den entsprechenden umgebenden Bereich festlegt. Zudem ist der frei wählbare und als konstant anzusehende Entwicklungspunkt möglichst sinnvoll zu wählen, um die Potenzreihe entsprechend einfach darzustellen, was durch die Wahl des Nullpunktes $X_j := 0_l$ erreicht wird. Hierdurch vereinfacht sich die auf die Nachbarschaft Y_j bezogene Darstellung der Bewegung (Rel. 2-139) mit Hilfe der Deformationsgradienten höherer Ordnung (Rel. 2-140) auf einen Ausdruck, der nur mehr den entsprechenden Bezugspunkt X_j beinhaltet:

$$\hat{x}_i(Y_l, t) \triangleq \hat{x}_i(X_l, t) = \hat{x}_i(X_l, t) + {}^1\hat{F}_{ij}(X_l, t) \cdot X_j + \frac{1}{2} \cdot {}^2\hat{F}_{ijk}(X_l, t) \cdot X_j \cdot X_k + \dots \quad (\text{Rel. 2-141})$$

Diese Form (Rel. 2-141) bezieht die nachbarschaftliche Umgebung durchaus noch ein! Setzt man sie in die allgemeine funktionale Form (Rel. 2-138) zur Beschreibung des mechanischen Spannungszustandes ein,

$$S_{ij} := \check{\mathcal{F}}_{ij}^{Y_l \in X_l}_{-\infty < s < t} [\hat{x}_k(Y_l, s), X_m] = \check{\mathcal{F}}_{ij}^{X_l}_{-\infty < s < t} [\hat{x}_k(X_l, s), X_m] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-142})$$

$$\mathcal{F}_{ij} = \check{\mathcal{F}}_{ij}^{X_l}_{-\infty < s < t} \left[\hat{x}_i(X_l, s) + {}^1\hat{F}_{ij}(X_l, s) \cdot X_j + \frac{1}{2} \cdot {}^2\hat{F}_{ijk}(X_l, s) \cdot X_j \cdot X_k + \dots, X_m \right]$$

so kann unter der Miteinbeziehung der Annahmen bezüglich der vernachlässigbaren nachbarschaftlichen Wechselwirkungen eine reduzierte geschichtsabhängige Darstellung des Konstitutivgesetzes formuliert werden. Zudem muss nach dem Prinzip der materiellen Objektivität der mechanische Spannungszustand unabhängig vom frei wählbaren Entwicklungspunktes in der Taylorreihendarstellung (Rel. 2-141) sein. Daraus resultierend ist der geschichtsabhängige Spannungszustand als Funktion der Deformationsgradienten und des Ortes darstellbar:

$$S_{ij} := \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{X_l}_{-\infty < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_p, s), {}^2\hat{F}_{ijk}(X_q, s), \dots, {}^N\hat{F}_{i_1 i_2 \dots i_N i_{N+1}}(X_a, s), X_b] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-143})$$

Darin ist eine explizite Ortsabhängigkeit im Konstitutivgesetz eher eine mathematische Konsequenz die im physikalischen Kontext sowie in den technisch relevanten Modellen kaum eine Rolle spielt. Damit kann der Spannungszustand schließlich folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$S_{ij} := \hat{\mathcal{F}}_{ij}^{X_l}_{-\infty < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_p, s), {}^2\hat{F}_{ijk}(X_q, s), \dots, {}^N\hat{F}_{i_1 i_2 \dots i_N i_{N+1}}(X_a, s)] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-144})$$

Hiermit ist das konstitutive Verhalten durch ein Funktional (Rel. 2-144) beschrieben, das die Geschichtsabhängigkeit der ersten N Deformationsgradienten höherer Ordnung an Stelle der materiellen Punkte X_j in der Beschreibung durch (Rel. 2-138) enthält. Es sei an dieser Stelle darauf verwiesen, dass solche Materialien ein vollständiges (bspw. bei Plastizität) oder teilweises Gedächtnis für ihre Zustandsgeschichte haben können. Daneben kann das Materialgesetz (Rel. 2-144) das Verhalten von Werkstoffen mit weitreichenden Wechselwirkungen (Rel. 2-138) nur näherungsweise beschreiben kann, da die Annahme von räumlich rasch abnehmenden Interaktionskräften zwischen den materiellen Punkten zu Grunde gelegt worden ist.

Allgemein spricht man bei Werkstoffen, welche durch die Beschreibung (Rel. 2-144) von Deformationsgradienten höherer Ordnung modellierbar sind, von Materialien oder Kontinua vom Grad N . Materialien höheren Grades ermöglichen bspw. eine genauere Beschreibung der mechanischen Eigenschaften elastischer und plastischer Kontinua mit körniger oder faseriger Struktur.

Im Folgenden werden die in den Abschnitten 2.1 bzw. 2.3.1 eingeführten Ansätze für lokale Kontinua zusammenfassend kurz beschrieben und die damit verbundenen Konstitutivgesetze als Spezialfall der allgemeinen Form (Rel. 2-144) nichtlokaler Modelle dargestellt.

Da laut Definition lokaler Kontinua der mechanische Zustand des betrachteten materiellen Punktes nur von seinem Ort sowie seiner Zustandsgeschichte abhängen darf, kann aus der allgemeinen funktionalen Darstellung (Rel. 2-138) die Unabhängigkeit von allen benachbarten materiellen Punkten (Koordinaten

Y_l) des Körpers \mathfrak{K} postuliert werden, woraus die folgende speziellere Form des konstitutiven Verhaltens resultiert:

$$\begin{aligned} S_{ij} &:= \check{\mathcal{F}}_{ij}^{Y_l \in X} [\hat{x}_k(Y_l, s), X_m, t] = \check{\mathcal{F}}_{ij}^{Y_l \in X} [\hat{x}_k(X_l, s), X_m, t] \\ S_{ij} &= \check{\mathcal{F}}_{ij}^{Y_l \in X} [\hat{x}_k(X_l, s), X_m, t] = \mathcal{F}_{ij} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-145})$$

Diese Darstellung (Rel. 2-145) kann auch die Geschichtsabhängigkeit des Spannungszustandes beschreiben, da dieser von allen Bewegungs- und damit Deformationszuständen aus der Vergangenheit ($-\infty < s < t$) abhängig ist, wobei diese Eigenschaft eine zentrale Voraussetzung zur mathematischen Beschreibung von viskoelastischem, plastischem und auch viskoplastischem Materialverhalten ist.

Ausgehend von den verschiedenen Modellen und den damit verbundenen unterschiedlichen funktionalen Beschreibungsweisen lokaler Kontinua (vgl. Abschnitt 2.3.1) kann festgehalten werden, dass der Deformationsgradient (Rel. 2-5) als alleinige Größe zur Darstellung des Verformungszustandes herangezogen wird, wobei dieser wiederum die zeitabhängige Bewegung der materiellen Punkte im Sinne von (Rel. 2-2) und (Rel. 2-3) sowie (Rel. 2-139) festlegt.

$$x_k := \hat{x}_k(X_l, s) := \check{x}_k(F_{ij}) = \check{x}_k(\hat{F}_{ij}(X_l, t)) \quad (\text{Rel. 2-146})$$

Setzt man die alleinige Abhängigkeit der Bewegung vom Deformationsgradienten 1. Ordnung in die lokale Form des Konstitutivgesetzes (Rel. 2-145) ein,

$$\begin{aligned} S_{ij} &:= \check{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [\check{x}_k(\hat{F}_{ij}(X_l, s)), X_m] = \check{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [\hat{F}_{ij}(X_l, s), X_m] = \\ &= \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_l, s), X_m] = \mathcal{F}_{ij} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-147})$$

so folgt eine spezielle lokale Darstellung der allgemeinen nichtlokalen Konstitutivgleichung (Rel. 2-143). Während das nichtlokale Stoffgesetz noch weitere höhere Deformationsgradienten berücksichtigt, wodurch ein beschränkter Einfluss der Umgebung des materiellen Punktes beschrieben wird entfällt dieser Einfluss bei der lokalen Form, da nur mehr der Deformationsgradient 1. Ordnung in der Abhängigkeit des mechanischen Spannungszustandes vorkommt. Eine explizite Ortsabhängigkeit des Spannungszustandes ist aufgrund derselben Argumente wie bei der nichtlokalen Darstellung des Konstitutivgesetzes (vgl. (Rel. 2-143) und (Rel. 2-144)) ebenfalls nicht gegeben, wodurch sich die lokale Materialgleichung (Rel. 2-147) in folgende Form überführen lässt:

$$S_{ij} := \bar{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_l, s), X_m] := \hat{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_l, s)] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-148})$$

Die explizite Ortsabhängigkeit der Spannungen widerspricht auch deshalb schon der physikalischen Anschauung, da zwei räumlich unterschiedliche Punkte mit gleichem Ausgangszustand und identischer Deformationsgeschichte zu gleichen Spannungszuständen führen müssen.

Außerdem sind die mechanischen Spannungen nicht immer – wie bei der Plastizität oder Viskoelastizität – durch die zeitliche Entwicklung der Deformation, sondern bei speziellen Fällen ausschließlich durch dessen momentanen Zustand, wie bspw. bei der Elastizität, determiniert, wodurch die Geschichtsabhängigkeit in der funktionalen Darstellung des Spannungszustandes (Rel. 2-148) keine Rolle mehr spielt. Durch die weitere vereinfachende Annahme, dass der mechanische Spannungszustand nur eine Funktion des Deformationsgradienten ist, der wiederum ausschließlich vom Ort und der momentanen Zeit abhängt, kann die Geschichtsabhängigkeit in der Funktionaldarstellung (Rel. 2-148) zusätzlich ignoriert werden, wodurch sich folgende Vereinfachung ergibt:

$$S_{ij} := \hat{\mathcal{F}}_{ij}^{t < s < t} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_l, s)] := \hat{\mathcal{F}}_{ij} [{}^1\hat{F}_{ij}(X_l, t)] = \mathcal{F}_{ij} \quad (\text{Rel. 2-149})$$

Exemplarisch sei an dieser Stelle noch die allgemeine Form eines elastischen Materials angegeben,

$$S_{ij} := \hat{S}_{ij}(E_{kl}) = \hat{S}_{ij}(\hat{E}_{kl}(\hat{F}_{rs}(X_m, t))) = \hat{S}_{ij}(\hat{F}_{rs}(X_m, t)) \quad (\text{Rel. 2-150})$$

um so auf die analoge Form zur der in diesem Abschnitt eingeführten allgemeinen funktionalen Darstellung des Konstitutivgesetzes hinzuweisen.

Rein mathematisch gesehen kann die Spannungsabhängigkeit (Rel. 2-138) eines materiellen Punktes entweder nur durch dessen Ort sowie der Zeit, oder aber auch mittels des dort vorliegenden Deformationsgradienten (Rel. 2-143) sowie dessen zeitliche Änderung beschrieben werden. Jede dieser mit Hilfe unterschiedlicher Funktionsabhängigkeiten dargestellten Formen des Konstitutivgesetzes repräsentiert nur eine spezielle Möglichkeit zur Beschreibung, die je nach Anwendungsfall zweckmäßig ist, wobei allgemeine grundlegende Prinzipien wie Kausalität, Determinismus oder Objektivität etc. stets zu erfüllen sind (vgl. Abschnitt 2.1).

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass durch die Mitberücksichtigung von Deformationsgradienten 2. und höherer Ordnung die Krümmungen in die konstitutive Beschreibung miteingeführt werden. Diese können in weiterer Folge mit intrinsischen Längen (bspw. Korngrößen) in Verbindung gebracht werden und dadurch einen Größen- bzw. Skaleneffekt im Modell bewirken. Dies ist für lokale Materialgesetze nicht möglich, da in ihnen die entsprechenden erweiterten kinematischen Größen keine Berücksichtigung finden.

Damit ist durch elementare und rein formale Schritte gezeigt, wie bestimmte konstitutive Modelle Spezialfälle eines verallgemeinerten funktionalen Beschreibungsansatzes (Rel. 2-138) darstellen, wodurch die Möglichkeit einer Kategorisierung der Konstitutivgesetze gegeben ist. In diesem Zusammenhang wird für lokale Werkstoffmodelle auch oft der Begriff „einfache Materialien“ verwendet.

2.3.2.2 Generalisierte Modelle, mikromorphe Kontinua

Im Rahmen der Gradientenmodelle wurde eine Skalenabhängigkeit durch Einführung von Deformationsgradienten 2. und höherer Ordnung ermöglicht, wobei dieser Ansatz nur eine Möglichkeit darstellt, Modelle geometrisch längenabhängig zu formulieren. Ein anderer Ansatz, der allerdings dasselbe Ziel verfolgt, führt weitere Freiheitsgrade in die übliche kontinuumsmechanische Beschreibungsweise (vgl. Abschnitt 2.1) ein. Diese zusätzlichen Freiheitsgrade werden innerhalb eines sogenannten Mikrokontinuums festgelegt, wobei das Mikrokontinuum an jeden materiellen Punkt des Makrokontinuums definierend angeheftet ist. Damit sind die Bewegungen und mechanischen Deformationszustände dieses Mikrokontinuums von der Kinematik des materiellen Punktes des Makrokontinuums völlig entkoppelt! Im Gegensatz dazu berücksichtigen die zuvor eingeführten Gradiententheorien zwar auch die Umgebung eines materiellen Punktes unter der Voraussetzung stark abklingender Wechselwirkungskräfte. Jedoch ist nach wie vor eine kinematische Kopplung zwischen dem materiellen Punkt und seiner Umgebung gegeben.

An dieser Stelle sei darauf verwiesen, dass durch die Festlegung des Mikrokontinuums eine intrinsische Länge in das Modell eingeführt wird, die in engem Zusammenhang mit den geometrischen Größen der Mikrostruktur von Materialien steht. Dadurch wird eine Größenabhängigkeit im Modell konstituiert, die es ermöglicht, entsprechende Phänomene auf unterschiedlichen geometrischen Längenskalen zu beschreiben. Zudem ist die Einführung eines Mikrokontinuums ein geeigneter Ansatz zur Beschreibung von Materialien mit individuellen Deformationen der Mikrostruktur wie dies beispielsweise bei Polymeren mit flexiblen Molekülketten, Flüssigkristallen mit sogenannten Seitenketten, Blut mit deformierbaren Zellen, Suspensionen mit deformierbaren Grundbestandteilen und bei turbulenter (Mikro-) Fluidik mit flexiblen wirbelnden Bewegungen (Eringen, 1999) vorliegt.

Durch die Einführung eines lokalen Koordinatensystems (\bar{X}_k bzw. \bar{x}_i), dessen Ursprung sich im betrachteten materiellen Punkt des Makrokontinuums (X_l bzw. x_j) befindet und der im Massenmittelpunkt des betrachteten Mikrokontinuums liegt, kann die entkoppelte Kinematik der neu eingeführten Freiheitsgrade beschrieben werden. Die Beschreibung der lokalen Kinematik der Mikrokontinua erfolgt nach denselben Prinzipien wie in der klassischen lokalen Theorie (vgl. Abschnitt 2.1), wobei die lokalen, sich auf das Mikrokontinuum beziehenden Größen im Folgenden mit einem Querstrich über dem verwendeten Symbol gekennzeichnet sind:

$$\bar{X}_k := \hat{\bar{X}}_k(x_j, \bar{x}_i, t) \quad \bar{x}_i := \hat{\bar{x}}_i(X_l, \bar{X}_k, t) \quad \bar{x}_l - \bar{X}_l := \bar{u}_l := \hat{\bar{u}}_l(X_a, \bar{X}_b, t) := \tilde{\bar{u}}_l(x_a, \bar{x}_b, t) \quad (\text{Rel. 2-151})$$

Damit kann die Bewegung innerhalb des Mikrokontinuums durch den Deformationsgradienten definiert werden,

$$d\bar{x}_i = \frac{\partial \hat{\bar{x}}_i(X_l, \bar{X}_k, t)}{\partial \bar{X}_j} \cdot d\bar{X}_j \quad \bar{F}_{kl} := \frac{\partial \hat{\bar{x}}_k(X_j, \bar{X}_i, t)}{\partial \bar{X}_l} = \overline{\text{Grad}} \left(\hat{\bar{x}}_k(X_j, \bar{X}_i, t) \right) = \hat{\bar{F}}_{kl}(X_j, \bar{X}_i, t) \quad (\text{Rel. 2-152})$$

wobei der lokale Deformationsgradient ein tangentielles Linienelement $d\bar{X}_j$ innerhalb des Mikrokontinuums von der Referenzkonfiguration in die entsprechende Momentankonfiguration transformiert ($d\bar{x}_i$). In Analogie zu Abschnitt 2.1.1 kann der Deformationsgradient des Mikrokontinuums \bar{F}_{kl} durch eine polare Zerlegung in zwei Anteile (vgl. (Rel. 2-6) bis (Rel. 2-9)) multiplikativ aufgespalten werden:

$$\bar{F}_{kl} := \bar{R}_{ki} \cdot \bar{U}_{il} = \hat{\bar{R}}_{ki}(X_p, \bar{X}_a, t) \cdot \hat{\bar{U}}_{il}(X_q, \bar{X}_b, t) = \hat{\bar{F}}_{kl}(X_i, \bar{X}_j, t) \quad (\text{Rel. 2-153})$$

Hiermit wird eine durch die Bewegung der materiellen Punkte resultierende Deformation in eine reine Streckung \bar{U}_{il} sowie Rotation \bar{R}_{ki} zerlegt. Durch diese Zerlegung können verschiedene Spezialfällen unterschieden werden, deren verallgemeinerter Fall das sogenannte mikromorphe Kontinuum darstellt:

$$\begin{aligned} d\bar{x}_i &= \hat{\bar{F}}_{ij}(X_l, \bar{X}_k, t) \cdot d\bar{X}_j = \bar{F}_{ij} \cdot d\bar{X}_j \\ d\bar{x}_i &= \hat{\bar{R}}_{ik}(X_p, \bar{X}_a, t) \cdot \hat{\bar{U}}_{kj}(X_q, \bar{X}_b, t) \cdot d\bar{X}_j = \bar{R}_{ik} \cdot \bar{U}_{kj} \cdot d\bar{X}_j \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-154})$$

Den wohl bekanntesten und wichtigsten Spezialfall stellen die sogenannten mikropolaren Kontinua dar, welche im Mikrokontinuum ausschließlich Starrkörperrotationen zulassen, wodurch die Kinematik durch folgende vereinfachte Form beschreibbar ist:

$$d\bar{x}_i = \hat{\bar{R}}_{ij}(X_p, \bar{X}_a, t) \cdot d\bar{X}_j = \bar{R}_{ij} \cdot d\bar{X}_j \quad (\text{Rel. 2-155})$$

Dieser spezielle Ansatz ist sehr gut geeignet, um beispielsweise Flüssigkeitskristalle mit starrer Molekülstruktur, Suspensionen mit Starrkörperpartikel, kurze Kohlenstofffasern in Kompositen, Knochenstruktur, Fluide mit magnetisierbaren Teilchen, Stäube in Wolken, Betonmischungen mit Sandkörner und auch schlammähnliche Fluide zu beschreiben (Eringen, 1999). Für eine tiefergehende Einführung sei an dieser Stelle auf die fundamentalen Arbeiten von (Cosserat & Cosserat, 1909), (Eringen, 1967) sowie (Besdo, 1974), (de Borst, 1991) und (Grammenoudis & Tsakmakis, 2001) verwiesen. Der in der vorliegenden Arbeit wichtige Aspekt von Versetzungsbewegungen in Zusammenhang mit verallgemeinerten Kontinuumstheorien ist in (Sansour & Skatrulla, 2007) übersichtlich und fundiert dargestellt.

Ein weiterer Spezialfall ist durch das sogenannte „Mikrostreckungskontinuum“ gegeben. Dieses stellt im Wesentlichen ein verallgemeinertes mikropolares Kontinuum dar, welches neben den Drehfreiheitsgraden noch eine zusätzliche, in alle drei Raumrichtungen isotrope Streckung (Dehnung) beschreiben kann. Die Kinematik dieser Bewegung ist einerseits durch den eigentlich orthogonalen Rotationstensor und andererseits durch den zusätzlich hinzukommenden skalaren Parameter, der die isotrope Streckung (Dehnung) beschreibt, darstellbar:

$$d\bar{x}_i = \bar{\lambda} \cdot \hat{\bar{R}}_{ij}(X_p, \bar{X}_a, t) \cdot d\bar{X}_j = \bar{\lambda} \cdot \bar{R}_{ij} \cdot d\bar{X}_j \quad (\text{Rel. 2-156})$$

Für detaillierte weitere Ausführungen zu dieser Kategorie verallgemeinerter Kontinua sei auf die Literatur verwiesen (Eringen, 1999).

Eine letzte wichtige Untergruppe von mikromorphen Kontinua stellen die „Mikrodehnungskontinua“ dar. Bei diesem Ansatz sind die Rotationen klein und können deshalb in der Mikrostruktur vernachlässigt werden, wobei die Dehnungen nun die dominanten Größen auf der Mikroskala repräsentieren, weshalb nur der entsprechende rechte Strecktensor zur Beschreibung der Kinematik Verwendung findet:

$$d\bar{x}_i = \hat{\bar{U}}_{ij}(X_p, \bar{X}_a, t) \cdot d\bar{X}_j = \bar{U}_{ij} \cdot d\bar{X}_j \quad (\text{Rel. 2-157})$$

Der Ansatz zur Formulierung von Mikrodehnungskontinua ist vor allem aus der Beschreibung von Metallschäumen entstanden, wobei für weitere Ausführungen auf die Literatur verwiesen sei (Forest & Sievert, 2006).

Die Erhaltungsgleichungen der vorgestellten generalisierten Theorie mikromorpher Kontinua sollen im Weiteren anhand eines verallgemeinerten hyperelastischen Materialverhaltens dargestellt werden. Analog zum Abschnitt 2.3.1.1 kann auch für ein verallgemeinertes Kontinuum hyperelastisches Materialverhalten definiert werden, wobei man bei der Herleitung von der freien spezifischen Energiefunktion ausgeht. Im Falle lokaler Kontinua hängt diese vom makroskopischen Verzerrungsgradienten ab, vgl. (Rel. 2-101) und (Rel. 2-102). Da bei generalisierten Kontinuumstheorien jedem makroskopischen materiellen Punkt ein lokales Mikrokontinuum mit entkoppelter Kinematik zugeordnet wird, resultieren daraus weitere kinematische Größen, vgl. (Rel. 2-151) - (Rel. 2-153), welche bei der Definition hyperelasti-

schen Materialverhaltens innerhalb der analogen Einführung einer freien Energiefunktion Berücksichtigung finden müssen. Es kann gezeigt und sinnvoll begründet werden (Eringen, 1999), dass im Falle mikromorphen hyperelastischen Materialverhaltens die freie innere Energiedichtefunktion ψ neben dem klassischen Deformationsgradienten der Makroskala F_{ij} auch vom Deformationsgradienten des Mikrokontinuums \bar{F}_{kl} und vom (Makro-)Gradienten $\partial \bar{F}_{uv} / \partial X_w$ der zuletzt genannten Mikrogröße abhängig ist:

$$\psi = \psi \left(\hat{F}_{ij}(X_a, t), \hat{\bar{F}}_{kl}(X_p, \bar{X}_b, t), \frac{\partial \hat{\bar{F}}_{uv}(X_q, \bar{X}_c, t)}{\partial X_w} \right) = \psi \left(F_{ij}, \bar{F}_{kl}, \frac{\partial \bar{F}_{uv}}{\partial X_w} \right) \quad (\text{Rel. 2-158})$$

Dabei stellt der (Makro-)Gradient des Mikrokontinuums eine Art lokale Krümmung dar und führt somit eine intrinsische Länge des Materials ein, welche den Einfluss benachbarter Regionen berücksichtigt.

Nach dem Prinzip der materiellen Objektivität muss die freie Energiedichtefunktion (Rel. 2-158) unabhängig von der Wahl des Bezugssystems und somit invariant bezüglich Verschiebungen und Drehungen des gewählten Koordinatensystems sein. Damit muss für jede beliebige Drehung, welche durch einen e Rotationstensor Q_{ij} darstellbar ist, die folgende Äquivalenzrelation gelten:

$$\psi = \psi \left(Q_{ik} \cdot F_{kj}, Q_{ka} \cdot \bar{F}_{al}, Q_{ub} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{bv}}{\partial X_w} \right) \quad (\text{Rel. 2-159})$$

Diese Äquivalenz muss für alle Rotationen, welche sich durch einen beliebigen Drehtensor Q_{ij} darstellen lassen, gelten, also auch für die spezielle Wahl des orthogonalen Drehtensors des Mikrokontinuums $Q_{ij} := \bar{R}_{ij}^{-1} = \bar{R}_{ij}^T = \bar{R}_{ji}$ (Rel. 2-153), woraus die folgende Darstellung resultiert.

$$\psi = \psi \left(\bar{R}_{ik}^{-1} \cdot F_{kj}, \bar{R}_{ka}^{-1} \cdot \bar{F}_{al}, \bar{R}_{ub}^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{bv}}{\partial X_w} \right) \quad (\text{Rel. 2-160})$$

Mit der Definitionsgleichung der polaren Zerlegung des Mikrokontinuums (Rel. 2-153) sowie den zur lokalen Theorie (vgl. Abschnitt 2.1.1) analogen Definitionsgleichungen des rechten Strecktensors des Mikrokontinuums \bar{U}_{il} , vgl. (Rel. 2-8), sowie weiteren Umrechnungen, auf die hier verzichtet wird, kann (Rel. 2-160) in folgende Gleichung überführt werden:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi \left(\bar{R}_{ik}^{-1} \cdot F_{kj}, \bar{R}_{ka}^{-1} \cdot \bar{F}_{al}, \bar{R}_{ub}^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{bv}}{\partial X_w} \right) = \psi \left(\bar{F}_{ik}^{-1} \cdot F_{kj}, \bar{U}_{ka} \cdot \bar{U}_{al}, \bar{F}_{ub}^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{bv}}{\partial X_w} \right) \\ &:= \psi(\epsilon_{ij}, \bar{\beta}_{kl}, \bar{K}_{uvw}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-161})$$

Daraus können finite Verzerrungs- und Krümmungsmaße für mikromorphe Kontinua abgeleitet werden, die meist für allgemeinere konstitutive Modelle im Rahmen generalisierter Kontinuumstheorien Verwendung finden:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij} &:= \bar{F}_{ik}^{-1} \cdot F_{kj} - \delta_{ij} \\ \bar{\beta}_{ij} &:= \frac{1}{2} \cdot (\bar{F}_{ik}^T \cdot \bar{F}_{kj} - \delta_{ij}) = \frac{1}{2} \cdot (\bar{U}_{ik} \cdot \bar{U}_{kj} - \delta_{ij}) = \bar{\beta}_{ji} \\ \bar{K}_{ijk} &:= \bar{F}_{il}^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{lj}}{\partial X_k} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-162})$$

Der Tensor ϵ_{ij} ist von der Verzerrung des Makro- und Mikrokontinuums abhängig. Zur geometrischen Interpretation dieses „gemischten“ Verzerrungstensors ϵ_{ij} kann festgehalten werden, dass dieser die durch die Deformation verursachte Differenz zwischen Tangentenvektoren an materiellen Linien des Makrokontinuums und den Änderungen von Normalvektoren an materiellen Flächen des Mikrokontinuums darstellt. Durch die Verknüpfung der Kinematik aus Mikro- und Makrokontinuum ist dieser Tensor offensichtlich nicht symmetrisch, was auch aus dessen Definitionsgleichung ersichtlich ist.

Mit $\bar{\beta}_{ij}$ wird ein Green-Lagrangescher Verzerrungstensor, vgl. (Rel. 2-13), für das Mikrokontinuum definiert. Dieser stellt analog zur klassischen lokalen Theorie die durch die Deformation verursachte Differenz zwischen Tangentenvektoren an materiellen Linien des Mikrokontinuums dar. Dieser Tensor besitzt, wie aus seiner Definitionsgleichung hervorgeht, eine symmetrische Struktur.

\bar{K}_{ijk} führt nichtlokale Effekte in die Theorie ein. Zur geometrischen Interpretation sei auf die Literatur zur Differentialgeometrie und speziell auf (Mindlin, 1964) verwiesen. Stark vereinfacht soll hierzu angemerkt sein, dass drei linear unabhängige, als Direktoren bezeichnete Vektoren eingeführt werden, die das an einem materiellen Punkt der Makroskala angeheftete Mikrokontinuum repräsentieren. Damit sind Richtungen von materiellen Linien festgelegt, die wiederum durch Winkel darstellbar sind, wobei die durch die Deformation verursachten Winkeländerungen auf die Bogenlänge dieser Linie bezogen werden und somit Krümmungen des Mikrokontinuums darstellen.

Es ist zu beachten, dass ϵ_{ij} , $\bar{\beta}_{ij}$ und \bar{K}_{ijk} sich auf die Referenzkonfiguration beziehen, wobei $\bar{\beta}_{ij}$ ein symmetrischer Tensor 2. Stufe und \bar{K}_{ijk} ein Tensor 3. Stufe ist. In Abhängigkeit von der vorliegenden Problemklasse kann es sinnvoll sein, die finiten Verzerrungsgrößen zu linearisieren, woraus entsprechende Vereinfachungen resultieren (vgl. Abschnitt 2.1.1). Nachfolgend sind diese Linearisierungen angegeben, wobei auf eine exakte Herleitung verzichtet wird.

$$\begin{aligned}\epsilon_{ij} &:= \bar{F}_{ik}^{-1} \cdot F_{kj} - \delta_{ij} \approx \frac{\partial \hat{u}_i(X_l, t)}{\partial X_j} - \frac{\partial \hat{u}_i(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_j} = H_{ij} - \bar{H}_{ij} \\ \bar{\beta}_{ij} &:= \frac{1}{2} \cdot (\bar{F}_{ik}^T \cdot \bar{F}_{kj} - \delta_{ij}) \approx \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial \hat{u}_i(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_j} + \frac{\partial \hat{u}_j(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_i} \right) = \frac{1}{2} \cdot (\bar{H}_{ij} + \bar{H}_{ji}) = \bar{\beta}_{ji} \quad (\text{Rel. 2-163}) \\ \bar{K}_{ijk} &:= \bar{F}_{il}^{-1} \cdot \frac{\partial \bar{F}_{lj}}{\partial \bar{X}_k} \approx \frac{\partial^2 \hat{u}_i(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_j \partial \bar{X}_k} = \frac{\partial}{\partial \bar{X}_k} \left[\frac{\partial \hat{u}_i(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_j} \right] = \frac{\partial \hat{H}_{ij}(X_a, \bar{X}_b, t)}{\partial \bar{X}_k}\end{aligned}$$

Es bleibt anzumerken, dass die hier vorgestellten Verzerrungsgrößen willkürlich gewählt worden sind und auch geringe Unterschiede im Vergleich zur fundamentalen Arbeit von (Mindlin, 1964) aufweisen. Dennoch haben sie sich durchgesetzt und finden in vielen publizierten Arbeiten weite Verbreitung.

Wie bei lokalen Kontinuumstheorien, kann im Rahmen der Herleitung der lokalen quasistationären Form der Impuls- und Drehimpulsbilanz für generalisierter Kontinuumsansätze vom Prinzip der virtuellen Arbeit ausgegangen werden, wobei auf eine detaillierte Darstellung hier verzichtet werden soll. Dabei können für hyperelastisches Materialverhalten bezüglich der Verzerrungstensoren ϵ_{ij} , $\bar{\beta}_{ij}$ und \bar{K}_{ijk} mit Hilfe des Verzerrungsenergiedichtepotentials (Rel. 2-161) thermodynamisch konjugierte Spannungsgrößen definiert werden.

$$T_{ij} := \frac{\partial \bar{\psi}(\epsilon_{ab}, \bar{\beta}_{kl}, \bar{K}_{uvw})}{\partial \epsilon_{ij}} \quad \bar{\Sigma}_{ij} := \frac{\partial \bar{\psi}(\epsilon_{ab}, \bar{\beta}_{kl}, \bar{K}_{uvw})}{\partial \bar{\beta}_{ij}} = \Sigma_{ji} \quad \bar{M}_{ijk} := \frac{\partial \bar{\psi}(\epsilon_{ab}, \bar{\beta}_{kl}, \bar{K}_{uvw})}{\partial \bar{K}_{ijk}} \quad (\text{Rel. 2-164})$$

Hierbei ist T_{ij} das Analogon zum klassischen (Cauchyschen) Spannungstensor der lokalen Theorie, wobei diese Größe aufgrund der entsprechenden Struktur der zugehörigen Verzerrungsgröße ϵ_{ij} keine Symmetrie besitzt. Mit $\bar{\Sigma}_{ij}$ wird ein symmetrischer Spannungstensor eingeführt, der zum Mikroverzerrungstensor $\bar{\beta}_{ij}$ thermodynamisch konjugiert ist. \bar{M}_{ijk} kennzeichnet einen mit dem Krümmungstensor \bar{K}_{ijk} verknüpften Momentenspannungstensor 3. Stufe. Rein formal gesehen können den Spannungstensoren T_{ij} und $\bar{\Sigma}_{ij}$ entsprechende Kräfte sowie translatorische Verschiebungen bzw. Verzerrungsgrößen ϵ_{ij} und $\bar{\beta}_{ij}$ zugeordnet werden. Analog sind dem Momentenspannungstensor \bar{M}_{ijk} entsprechende Drehmomente sowie daraus resultierende Rotationen und Krümmungen \bar{K}_{ijk} assoziierbar. Es sei an dieser Stelle darauf verwiesen, dass aufgrund der mitberücksichtigten Mikrostruktur die Drehimpulsbilanz als zusätzliche Gleichung ins Gesamtmodell hinzukommt, welche im Unterschied zu den klassisch-lokalen Theorien nicht identisch erfüllt ist. Zusätzlich liegt noch eine Nichtsymmetrie im Spannungstensor der Impulsbilanz vor.

Um das komplette gekoppelte partielle Differentialgleichungssystem für mikromorphe Kontinua anzugeben, sind in Analogie zur lokalen klassischen Theorie weitere Größen einzuführen, welche eine vergleichbare physikalische Bedeutung besitzen wie z.B. die Volumenkraftdichte \tilde{b}_i , siehe (Rel. 2-54), und die einer Flächennormalen n_i zugeordneten Spannung \tilde{t}_i , siehe (Rel. 2-57) bzw. vgl. Abschnitt 2.1.5 sowie (Mindlin, 1964), (Mindlin, 1965). Daraus resultierend kann zu der auf ein Volumenelement wirkende Kraft $\tilde{b}_i := \hat{b}_i(X_j, t)$ ein entsprechendes „Volumenmoment“ $\bar{\phi}_{ij} := \hat{\phi}_{ij}(X_k, t)$ (Volumenmomentendichte bzw. „Double Forces per Volume“) eingeführt werden, wobei diese Größe direkt mit dem Momentenspannungstensor \bar{M}_{ijk} assoziierbar ist. Außerdem kann in Analogie zu der auf ein Oberflächenelement mit dem Normalenvektor n_i wirkenden Spannung $\tilde{t}_i := \hat{t}_i(X_k, n_l, t)$ eine Momentenspannung $\bar{\Lambda}_{ij} := \hat{\Lambda}_{ij}(X_k, n_l, t)$ eingeführt werden („Double Forces per Area“), welche ebenfalls mit dem Momen-

tensnungstensor \bar{M}_{ijk} assoziiert ist. Die Diagonalkomponenten beider Größen (Dyaden) $\bar{\phi}_{ij}$ bzw. $\bar{\Lambda}_{ij}$ sind „Double Forces“ ohne Moment, die restlichen Komponenten sind „Double Forces“ mit Moment. In beiden Fällen gibt der erste Index die Orientierung des Hebelarms zwischen den Kräften, der zweite Index die Orientierung der Kräfte an. Bei einer Fläche mit äußerem Einheitsnormalenvektor n_i in positiver Koordinatenrichtung zeigt die Kraft am positiven Ende des Hebelarms in positive Richtung und die am negativen Ende in negative Richtung. Bei Flächen mit Normalen in negativer Koordinatenrichtung gelten umgekehrte Beziehungen.

Mit Hilfe der eingeführten Größen lässt sich die lokale und quasistationäre Form der Impulsbilanz

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + \tilde{b}_i = 0_i \quad (\text{Rel. 2-165})$$

und Drehimpulsbilanz formulieren, wobei beide Gleichungssysteme entsprechende Volumenkraft- \tilde{b}_i und Volumenmomentendichten $\tilde{\phi}_{ij}$ berücksichtigen:

$$\frac{\partial \bar{M}_{ijk}}{\partial x_k} + T_{ij} - \bar{\Sigma}_{ij} + \bar{\phi}_{ij} = 0_i \quad (\text{Rel. 2-166})$$

Zusätzlich sind noch die Belastungsrandbedingungen anzugeben, die aus den 3 Spannungsrandbedingungen \tilde{t}_i

$$\hat{t}_i(X_k, n_l, t) = T_{ik} \cdot n_k = \tilde{t}_i = \hat{\tilde{t}}_i(X_k, n_l, t) \quad \forall (X_k \in \partial^T V \wedge t \geq 0) \quad (\text{Rel. 2-167})$$

und den 9 Momentenspannungsrandbedingungen bestehen:

$$\hat{\Lambda}_{ij}(X_k, n_l, t) = \bar{M}_{ijk} \cdot n_k = \bar{\Lambda}_{ij} = \hat{\bar{\Lambda}}_{ij}(X_k, n_l, t) \quad \forall (X_k \in \partial^{\bar{\Lambda}} V \wedge t \geq 0) \quad (\text{Rel. 2-168})$$

Die Impulsbilanzgleichung (Rel. 2-165) entspricht derjenigen der klassischen lokalen Theorie, vgl. (Rel. 2-56). Die zugehörigen Randbedingungen sind durch (Rel. 2-167) gegeben, vgl. (Rel. 2-57). Als zusätzliche Bedingung muss allerdings die lokale Form der Drehimpulsbilanz (Rel. 2-166) mit den zugehörigen Momentenspannungsrandbedingungen (Rel. 2-168) im Rahmen der generalisierten nichtlokalen Kontinuumstheorie berücksichtigt werden. Hierbei kann man die 27 Komponenten des Momentenspannungstensors \bar{M}_{ijk} in Analogie zu $\bar{\phi}_{ij}$ und $\bar{\Lambda}_{ij}$ als „Double Forces“ pro Fläche verstehen.

Damit sind die wesentlichen Aspekte der lokalen, nichlokalen und generalisierten Kontinuumstheorien beschrieben, womit der Unterabschnitt 2.3 abgeschlossen werden kann.

2.4 Inkrementelle und absolute Formulierung, Deformationstheorie

In diesem Abschnitt wird kurz auf die wichtigsten Darstellungen der Spannungs-Dehnungsbeziehungen eingegangen. Allgemein kann festgehalten werden, dass jede Deformations- oder Laständerung eine entsprechende Spannungs- oder Dehnungsänderung nach sich zieht. Die Formulierung des aktuellen mechanischen Zustandes kann entweder über die Änderungen der entsprechenden Größen oder aber durch die absolute Darstellung derselben erfolgen. Da jede mechanische Zustandsänderung sich in einem zeitlichen Kontext vollzieht, ist es naheliegend, die Konstitutivgesetze in differentieller Form bezüglich eines skalaren Parameters darzustellen, der im Allgemeinen die Zeit repräsentiert, aber bei nichtviskosen Materialverhalten auch als Lastparameter interpretiert werden kann. Durch die differentielle Formulierung der Stoffgleichungen werden Änderungen der mechanischen Zustände bezüglich des skalaren Parameters (Zeit) beschrieben, weshalb diese Darstellung auch als inkrementelle Darstellung bezeichnet wird, da durch die Änderungen Inkremente determiniert sind, aus denen sich vom vorherigen der aktuelle Zustand berechnen lässt.

Als einfaches Beispiel sei an dieser Stelle die inkrementelle Form der hyperelastischen Materialgleichungen (siehe Abschnitt 2.3.1.1) angeführt, vgl. (Rel. 2-102):

$$\dot{S}_{ij} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij}} = \frac{\partial}{\partial C_{ij}} \frac{\partial \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial C_{ij}} \frac{\partial \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ab}} \cdot \frac{\partial C_{ab}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij} \partial C_{ab}} \cdot \frac{\partial C_{ab}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \hat{\psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij} \partial C_{ab}} \cdot \dot{C}_{ab} \quad (\text{Rel. 2-169})$$

Dabei beziehen sich alle Größen in (Rel. 2-169) auf die Referenzkonfiguration, deren Basissystem zeitunabhängig ist, weshalb die objektive (inkrementelle) Ratenformulierung direkt durch die einfache Zeitableitung repräsentiert wird (siehe Abschnitt 2.1.4). Daraus resultierend (Rel. 2-169) kann der Steifigkeitstensor \mathbb{C}_{ijab} eingeführt werden, der sich vollständig auf die Referenzkonfiguration bezieht :

$$\dot{S}_{ij} = \mathbb{C}_{ijab} \cdot \frac{\partial C_{ab}}{\partial t} = \mathbb{C}_{ijab} \cdot \dot{C}_{ab} \quad \text{mit} \quad \mathbb{C}_{ijab} := \frac{\partial^2 \hat{\Psi}(C_{kl})}{\partial C_{ij} \partial C_{ab}} \quad (\text{Rel. 2-170})$$

Aus der Definitionsgleichung des Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors (Rel. 2-13) geht hervor, dass die Verwendung des rechten Cauchy-Green-Tensors C_{ik} als unabhängige Größe äquivalent ist zur Darstellung, welche auf dem Green-Lagrangeschen Verzerrungstensor basiert. Beide Größen (E_{ik} bzw. C_{ik}) unterscheiden sich nur durch den konstanten Einheitstensor und den Faktor $1/2$, was durch elementare Rechnung gezeigt werden kann:

$$\dot{E}_{ik} = \frac{\partial E_{ik}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \cdot (C_{ik} - \delta_{ik}) \right] = \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial C_{ik}}{\partial t} = \frac{1}{2} \cdot \dot{C}_{ik} \Rightarrow \dot{C}_{ik} = 2 \cdot \dot{E}_{ik} \quad (\text{Rel. 2-171})$$

Da ein Konstitutivgesetz üblicherweise Spannungen und Verzerrungen miteinander verknüpft, stellt die Formulierung (Rel. 2-169) bzw. (Rel. 2-170), welche den rechten Cauchy-Green-Tensor als unabhängige Größe/Variable verwendet, eine völlig äquivalente Darstellung eines allgemeinen Materialgesetzes dar.

Formuliert man die inkrementelle Darstellung des hyperelastischen Materialgesetzes von der Referenz- in die Momentankonfiguration um, so sind objektive Spannungsrate aufgrund des zeitlich sich verändernden Basissystems erforderlich. Es ist hierfür zweckmäßig, den Kirchhoffschen Spannungstensor ς_{ij} zu verwenden, dessen objektive Zeitableitung zur Spannungsrate des 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors \dot{S}_{ab} mit (Rel. 2-49) in Beziehung steht:

$$\mathcal{L} \circ \varsigma_{pq} := F_{pv} \cdot \dot{S}_{vw} \cdot F_{qw} = F_{pv} \cdot \mathbb{C}_{vwab} \cdot \dot{C}_{ab} \cdot F_{qw} \quad (\text{Rel. 2-172})$$

Zudem ist die Zeitableitung des rechten Cauchy-Green-Tensors \dot{C}_{ik} mit der symmetrischen räumlichen Verzerrungsgeschwindigkeit d_{ij} , welche die kinematisch konjugierte Größe zum Kirchhoffschen Spannungstensor ς_{ij} darstellt, durch die Gleichungen (Rel. 2-171) bzw. (Rel. 2-23) verknüpft:

$$\dot{C}_{ab} = 2 \cdot \dot{E}_{ab} = 2 \cdot F_{la} \cdot d_{lk} \cdot F_{kb} \quad (\text{Rel. 2-173})$$

Daraus resultierend kann die inkrementelle hyperelastischen Konsitutivgleichung (Rel. 2-170) unter Berücksichtigung der materiellen Objektivität von der Referenz- in die Momentankonfiguration überführt werden

$$\mathcal{L} \circ \varsigma_{pq} = F_{pv} \cdot \mathbb{C}_{vwab} \cdot 2 \cdot F_{la} \cdot d_{lk} \cdot F_{kb} \cdot F_{qw} = 2 \cdot F_{pv} \cdot F_{qw} \cdot \mathbb{C}_{vwab} \cdot F_{la} \cdot F_{kb} \cdot d_{lk} \quad (\text{Rel. 2-174})$$

wobei ein Steifigkeitstensor \mathbb{C}_{pqlk} definierend eingeführt ist,

$$\mathbb{C}_{pqlk} := 2 \cdot F_{pv} \cdot F_{qw} \cdot \mathbb{C}_{vwab} \cdot F_{la} \cdot F_{kb} \quad (\text{Rel. 2-175})$$

der sich vollständig auf die Referenzkonfiguration bezieht und die eigentliche konstitutive Größe darstellt. Damit kann die inkrementelle Formulierung des objektiven Materialgesetzes endgültig wie folgt angegeben werden:

$$\mathcal{L} \circ \varsigma_{pq} = \mathbb{C}_{pqlk} \cdot d_{lk} \quad (\text{Rel. 2-176})$$

Dieser inkrementellen Formulierung (hyper)elastischen Materialverhaltens stehen die absoluten Formulierungen aus dem Abschnitt 2.3.1.1 gegenüber, innerhalb derer die absoluten Spannungs- und Verzerrungsgrößen zueinander in Beziehung gesetzt sind und nicht die resultierenden Spannungsinkremente aus vorgegebenen Verzerrungsänderung wie bei der inkrementellen Formulierung. Es ist offensichtlich, dass beide Formulierung zu den Selben Ergebnissen führen müssen, da beide Darstellungen durch mathematische Umformungen ineinander überführbar sind.

Anders als bei der (Hyper-) Elastizität sind die konstitutiven Gleichungen im Rahmen der Plastizität bereits durch deren Ansatz in inkrementeller Form dargestellt, was im Abschnitt 2.3.1.2 durch eine in der Referenzkonfiguration formulierten Beschreibung dargelegt ist. Die inkrementelle Formulierung im Rahmen der Metallplastizität ist vor allem dann zu verwenden, wenn keine kontinuierlich ansteigenden Belastungen, sondern zwischenzeitliche Reduktionen bzw. Zyklierungen der Belastungen auftreten. In einigen Fällen, so wie z.B. bei den in der Praxis oft zu untersuchenden Grenzbelastungsfällen, sind jedoch aufgrund der stetig steigenden äußeren Lasten oft monoton ansteigende Spannungen in der mechanischen Struktur zu erwarten. Für diese Fälle kann die inkrementelle Formulierung der klassischen Metallplastizität in eine Darstellung umgewandelt werden, die in der Beschreibung absolute Spannungs- und Dehnungsgrößen enthält, wobei diese Art der Formulierung als Deformationstheorie oder

totale Dehnungstheorie bezeichnet wird (Gross & Seelig, 2006). Ein einfacher Ansatz für infinite Deformationen, welche einen proportionalen Lastanstieg voraussetzt, wurde bereits von (Hencky, 1924), (Ilyushin, 1947), (Ilyushin, 1963) vorgeschlagen und wird nachfolgend in aller Kürze dargestellt.

Resultierend aus der Voraussetzung kleiner Verzerrungen (Rel. 2-14) kann eine additive Zerlegung der Gesamtdehnung ε_{ij} in einen elastischen ε_{ij}^e und plastischen ε_{ij}^p Anteil angesetzt werden:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p \quad (\text{Rel. 2-177})$$

Geht man von der Inkompessibilität plastischer Deformationen aus, ist es zweckmäßig, die Konstitutivgleichungen in deviatorischen Größen zu beschreiben, wozu der infinite Dehnungs- ε'_{ij} und Spannungsdeviator σ'_{ij} wie folgt definiert ist:

$$\varepsilon'_{ij} = \varepsilon_{ij} + \frac{1}{3} \cdot \varepsilon_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad \sigma'_{ij} = \sigma_{ij} + \frac{1}{3} \cdot \sigma_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 2-178})$$

Bei inkompressiblem Materialverhalten kann zudem das zugrunde gelegte isotrope lineare Hookesche Elastizitätsgesetz in einer aufgespalteten Darstellung formuliert werden, das aus einem hydrostatischen (volumetrischen) sowie deviatorischen Anteil besteht

$$p := \sigma_{ll} = 3 \cdot K \cdot \varepsilon_{kk} \quad \sigma'_{ij} = 2 \cdot \mu \cdot \varepsilon'_{ij} \quad \varepsilon_{ij}^e = \varepsilon_{ij} + \frac{1}{3} \cdot \varepsilon_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 2-179})$$

wobei K der Kompressionsmodul und μ der Schubmodul ist.

Wie bereits erwähnt, wird bei der deformationstheoretischen Darstellung eine (streng) monoton wachsende proportionale Belastung vorausgesetzt, die sich auf einen Ausgangszustand bezieht der durch die Spannung ${}^0\sigma'_{ij}$ charakterisiert ist, wobei dieser Umstand durch folgende Beziehungen beschrieben werden kann:

$$\sigma'_{ij} = c(t) \cdot {}^0\sigma'_{ij} \quad c(t=0) = 1 \quad c(t_k) > c(t_l) \quad \forall \quad t_k > t_l \quad (\text{Rel. 2-180})$$

Diese Voraussetzung (Rel. 2-180) impliziert, dass sich die Hauptachsenrichtungen während der Deformation sowie im Laufe der (monoton zunehmenden) Belastungen nicht verändern und deshalb stets parallel zum Hauptachsensystem des Ausgangszustandes ${}^0\sigma'_{ij}$ sind.

Als zentrale Annahme wird bei der Deformationstheorie davon ausgegangen, dass sich die Umkehrung der Spannungs- (plastischen) Dehnungsbeziehung durch den unten angeführten Ansatz darstellen lässt

$$\varepsilon_{ij}^p = \lambda \cdot \sigma'_{ij} = \hat{\lambda}(\sigma'_{kl}, \varepsilon_{ij}^p) \cdot \sigma'_{ij} \quad \lambda := \hat{\lambda}(\sigma'_{kl}, \varepsilon_{ij}^p) \quad (\text{Rel. 2-181})$$

wobei (Rel. 2-181) rein formal der Bestimmungsgleichung (Rel. 2-114) zur Ermittlung der Fließrichtung im Rahmen der inkrementellen Formulierung entspricht. Wird in der inkrementellen Formulierung die Fließrichtung durch die Ableitung der Fließbedingung $f = \hat{f}(s_{ij}, q_{kl}, y)$ nach den aktuellen Spannungszuständen s_{ij} determiniert, vgl. (Rel. 2-114), so wird die Fließrichtung im Rahmen der Deformationstheorie ausschließlich vom aktuellen Spannungszustand σ'_{ij} festgelegt. Der skalare Multiplikator λ , der die Größe der plastischen Deformation beschreibt, hängt im Allgemeinen vom aktuellen Spannungszustand σ'_{ij} und der Belastungsgeschichte, die im Wesentlichen durch die bleibenden plastischen Dehnungen ε_{ij}^p charakterisiert sind, ab.

Unter Verwendung der von Mises Fließbedingung

$$f(\sigma'_{ij}, y) := J_2' - y^2 = 0 \quad J_2' = \frac{1}{2} \cdot \sigma'_{ij} \cdot \sigma'_{ij} \quad y := \frac{\sigma_e}{\sqrt{3}} \quad \sigma_e := \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \sigma'_{ij} \cdot \sigma'_{ij}} \quad (\text{Rel. 2-182})$$

worin J_2' die zweite Invariante des Spannungsdeviators σ'_{ij} darstellt und σ_e die effektive äquivalente Vergleichsspannung nach von Mises sowie y die isotrope Fließspannung ist, kann man die Abhängigkeit der plastischen Dehnung vom Spannungsdeviator in der Form

$$\varepsilon_{ij}^p = \frac{3}{2} \cdot \frac{\varepsilon_e^p}{\sigma_e} \cdot \sigma'_{ij} \quad \varepsilon_e^p := \sqrt{\frac{3}{2} \cdot \varepsilon_{ij}^p \cdot \varepsilon_{ij}^p} \quad (\text{Rel. 2-183})$$

darstellen. Dabei wird mit ε_e^p die effektive äquivalente plastische Vergleichsdehnung definiert. Die Beziehung (Rel. 2-183) ist für den Fall der monotonen proportionalen Belastung äquivalent zur inkrementellen Beschreibung der Plastizität ($\varepsilon_{ij}^p \rightarrow \varepsilon_{ij}^p \cdot dt = d\varepsilon_{ij}^p$; $\varepsilon_e^p \rightarrow \varepsilon_e^p \cdot dt = d\varepsilon_e^p$). Durch den Vergleich zwischen (Rel. 2-181) und (Rel. 2-183) folgt unmittelbar der skalare Multiplikator λ

$$\varepsilon_{ij}^p = \frac{3}{2} \cdot \frac{\varepsilon_e^p}{\sigma_e} \cdot \sigma'_{ij} = \hat{\lambda}(\sigma'_{kl}, \varepsilon_{ij}^p) \cdot \sigma'_{ij} \quad \lambda = \hat{\lambda}(\sigma'_{kl}, \varepsilon_{ij}^p) = \frac{3}{2} \cdot \frac{\varepsilon_e^p}{\sigma_e} \quad (\text{Rel. 2-184})$$

welcher die Größe der plastischen Deformation beschreibt. Invertiert man die inkompressible Darstellung des verwendeten Hookesche Elastizitätsgesetzes (Rel. 2-179) und setzt den Anteil der elastischen (Rel. 2-179) und plastischen (Rel. 2-184) Dehnungen in die additive Zerlegung (Rel. 2-177) der (deviatorischen) Gesamtdehnung ein, so erhält man das sogenannte Hencky-Ilyushin-Gesetz:

$$\varepsilon_{kk} = \frac{1}{3 \cdot K} \cdot \sigma_{kk} \quad \varepsilon_{ij} = \left(\frac{1}{2 \cdot \mu} + \frac{3}{2} \cdot \frac{\varepsilon_e^p}{\sigma_e} \right) \cdot \sigma'_{ij} = \mathbb{K} \cdot \sigma'_{ij} \quad \mathbb{K} = \frac{1}{2 \cdot \mu} + \frac{3}{2} \cdot \frac{\varepsilon_e^p}{\sigma_e} \quad (\text{Rel. 2-185})$$

Die Gleichung (Rel. 2-185) beschreibt plastisches Verhalten für monoton zunehmende Proportionalitätsbelastung und ist im Gegensatz zur inkrementellen Darstellung nur durch absolute Dehnungs- und Spannungsgrößen formuliert. Zudem besitzt diese Beziehung (Rel. 2-185) rein formal gesehen auch eine analoge Form in Bezug zum Konstitutivgesetz hyperelastischen Materialverhaltens, vgl. (Rel. 2-111). Deshalb ist die deformationstheoretische Darstellung plastischen Materialverhaltens konsequenterweise nur für monoton wachsende Belastungszustände streng gültig, da offensichtlich bei Be- und Entlastungen nur mechanische Zustände abgebildet werden können, die auf derselben – im Allgemeinen nichtlinearen – Spannungs-Dehnungsbeziehung liegen.

Die Deformationstheorie lässt sich auch für finite Deformationen einsetzen, da dann der rotatorische Anteil (Rel. 2-7) in der polaren Zerlegung (Rel. 2-6) des Deformationsgradienten F_{ij} zum Einheitstensor $R_{ij} = \delta_{ij}$ wird. Man führt dazu die sogenannten logarithmischen bzw. wahren Dehnungen ein, welche sich aus der Eigenwertdarstellung (bzw. Hauptstreckung) des symmetrischen positiv definiten rechten Strecktensors U_{ij} formulieren lassen, vgl. (Rel. 2-8)

$$H_{ij} := \ln U_{ij} = \sum_{k=1}^3 \ln \lambda_k \cdot {}^k n_i \cdot {}^k n_j \quad (\text{Rel. 2-186})$$

wobei in (Rel. 2-186) die Summation bezüglich des 3-fach vorkommenden Sub- bzw. Superskripts k ausschließlich über den Summenoperator durchzuführen ist. Zudem ist in (Rel. 2-186) mit H_{ij} der sogenannte Henckysche Verzerrungstensor definiert, ${}^k n_i$ bezeichnet die k -te Hauptrichtung (Eigenvektor) zur korrespondierenden k -ten Hauptdehnung (Eigenwert) des symmetrischen positiv definiten rechten Strecktensors U_{ij} . Inkompressibilität lässt sich nun über die Beziehung

$$\sum_{k=1}^3 \ln \lambda_k = 0 \quad (\text{Rel. 2-187})$$

erfüllen, und man kann in diesem speziellen Fall die additive Zerlegung des Verzerrungsmaßes in einen elastischen und plastischen Anteil verwenden, vgl. (Rel. 2-177).

Damit sind alle wesentlichen Konzepte zur Deformationstheorie beschrieben, welche einen zentralen Punkt im mikromechanisch motivierten Homogenisierungsansatz des in dieser Arbeit vorgestellten „Mechanism based Strain Gradient“ Plastizitätsmodells (siehe Abschnitt 3.3) darstellt.

2.5 Riss- und Schädigungsbeschreibung

Ziel dieses Abschnitts ist es, elementare Begrifflichkeiten und Konzepte zur kontinuumsmechanischen Beschreibung von diskreten Imperfektionen zu geben, sowie diese im Rahmen von numerischen Methoden einzubetten. Dabei wird der Begriff Imperfektion in dieser Arbeit als ein verallgemeinerter Terminus für Fehlstellen, Poren, Grenzflächenrissen oder auch anderen diskreten Strukturen bzw. Objekten, die als fehlerhafte Unregelmäßigkeiten angesehen werden können, verwendet.

Aufgrund des Umfangs und der Komplexität des Bruch- und Schädigungsverhaltens von duktilen (Metall dünn schicht) aber auch spröden (Substrat) Materialien, kann hier kein Überblick dieses Gebiets in entsprechend kurzem Rahmen gegeben werden, weshalb auf Standardwerke zu diesem Gebiet (Gross & Seelig, 2006), (Lemaitre, 1992), (Lemaitre & Chaboche, 1990), (Rossmann, 1982) verwiesen sei.

Um der prinzipiellen Aufgabenstellung zur Abbildung und Modellierung von Imperfektionen gerecht zu werden, sind verschiedenste Konzepte verwendbar, welche allerdings mit unterschiedlichem Aufwand

umzusetzen und deshalb für den vorgegebenen Rahmen dieser Arbeit nur bedingt geeignet sind. Bezüglich der numerischen Umsetzung können aus der Vielzahl von Ansätzen zur Beschreibung bruchmechanischer Vorgänge zwei Kategorien klassifizierend eingeführt werden.

- I. Verschmierte Rissmodelle (engl. „smeared crack models“)
- II. Diskrete Rissmodelle (engl. „discrete crack models“)

Die Anwendung von verschmierten Rissmodellen ist für Untersuchungen zweckmäßig, bei denen das globale Last-Verschiebungsverhalten der Struktur Gegenstand der Analyse ist, ohne Bezug auf realistische lokale Spannungsverteilungen und Risspfade. Zur detaillierten Modellierung von lokalem Strukturverhalten, Risspfaden oder der Richtung des Rissfortschritts eignen sich die diskreten Rissmodelle im Allgemeinen besser.

Bei den verschmierten Rissmodellen (I.) wird die Imperfektion als diskrete Struktur innerhalb des Materials nicht direkt als solche aufgelöst. Dabei wird der lokale Einfluss der Imperfektion in seiner Umgebung auf die Steifigkeit sowie die aus den Deformationen resultierende Spannung berücksichtigt, indem diese Größen von dem vorhandenen Schädigungsfortschritt als abhängige Größen angesetzt werden. Dieser Ansatz kann im Rahmen der Kontinuumsmechanik unterschiedlich umgesetzt werden. So kann beispielsweise durch das ganz allgemeine Konzept ein skalarer Schädigungsparameter D eingeführt werden. Bei dem Großteil dieser Ansätze kann sich die Evolution des Schädigungsparameters nur in eine Richtung hin entwickeln, was durch eine monotone Zunahme des meist zwischen 0 und 1 normierten Parameters D beschrieben wird.

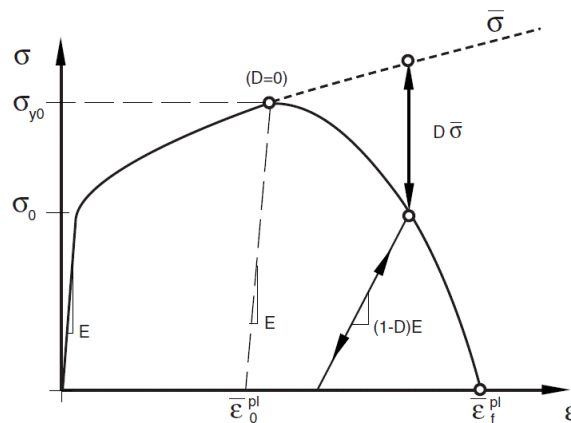


Bild 2-42: Schädigungsentwicklung und entfestigendes Materialverhalten

Dadurch wird zum Ausdruck gebracht, dass sich die Entwicklung einer Imperfektion im allgemeinen nur weiterbilden bzw. höchstens jedoch zum Stillstand kommen kann. So ist es bspw. einem einmal gebildeten Riss nur möglich weiterzuwachsen oder im besten Fall gleich groß zu bleiben, nicht aber wieder zusammenzuwachsen oder ganz zu verschwinden. Exemplarisch ist das eben beschriebene Konzept in Bild 2-42 dargestellt. Darin zeigt das Material bis zum Schädigungsbeginn $D = 0$ verfestigendes Verhalten und behält bis zu diesem Zustand seine Steifigkeit bei. Nach Schädigungsbeginn verringert sich die Steifigkeit durch den Elastizitätsmodul E im gleichen Maße wie die Schädigung entsprechend zunimmt, was nach der physikalischen Anschauung und Erfahrung auch plausibel ist. Definiert man verfestigendes Materialverhalten durch eine positive Steigung des Spannungsverlaufes in Bezug zur Dehnung und die Entfestigung mit einer entsprechend negativen Steigung, so können für das Konstitutivgesetz im Zusammenhang mit dem Schädigungsverhalten die folgenden Zusammenhänge festgestellt werden: Bei Schädigungsbeginn wird die Verfestigung $\bar{\sigma}$ zusätzlich durch einen mit der Schädigungsvariablen D verknüpften Anteil $D \cdot \bar{\sigma}$ verringert. Durch diese Reduktion der Verfestigung stellt sich in Abhängigkeit der Schädigungsentwicklung eine Entfestigung im Materialverhalten ein, wobei der Spannungsabfall mit steigender Dehnung nicht unbedingt mit dem Schädigungsbeginn $D = 0$ zusammenfallen muss, da ein Spannungsabfall sowohl von der Zunahme der Entfestigung als auch von jener der Schädigung abhängt. D. h., ändert sich die Schädigung weniger rasch als die Verfestigung zunimmt, ist trotzdem, wenngleich auch in verminderten Ausmaß, ein Zuwachs in der Spannung beobachtbar. Erst wenn sich die Schädigung im Vergleich zur Verfestigung rascher ändert, stellt sich tatsächlich auch entfestigendes Materialverhalten ein. Ein weiterer wichtiger Ansatz bei der verschmierten Formulierung von Imperfektionen ist die Beschreibung des Schädigungsbeginns, der oft auch als Versagenskriterium bezeichnet wird. Dieses

wird allgemein durch Gleichungssysteme festgelegt, die sich zumeist entweder auf die sich einstellenden Spannungs- oder aber auch auf Deformationsgrößen beziehen. In manchen Fällen kann es jedoch physikalisch sinnvoll oder auch erforderlich sein, andere Größen, wie bspw. Energien usw. zur Festlegung des Schädigungsbeginns zu verwenden. Grundsätzlich ist zu sagen, dass sich verschmierte Rissmodelle sowie Schädigungsmodelle durch den eben beschriebenen Ansatz relativ ähnlich sind. Einen Vergleich zwischen einem verschmierten Rissmodell und einem isotropen Schädigungsmodell im Zusammenwirken mit unterschiedlichen Konstitutivmodellen wird in (Olivier, Carvera, Oller, & Lubliner, 1990) diskutiert. Verschmierte Rissmodelle, die auf der klassischen Kontinuumsmechanik basieren, wurden unter Berücksichtigung der Konzepte der Schädigungsmechanik und der klassischen Plastizitätstheorie in verschiedenen Arbeiten in einschlägiger Fachliteratur vorgeschlagen und publiziert (Mazars & Pijaudier-Cabot, 1989), (Feenstra & de Borst, 1995).

Außerdem ist zu erwähnen, dass die im Allgemeinen differentialalgebraischen Gleichungssysteme, welche die Evolution des Schädigungsparameters darstellen, im Wesentlichen die physikalischen Modellvorstellungen in Bezug auf die Entwicklung der Imperfektion beschreiben. Diese Entwicklung ist stark davon abhängig, ob es sich um duktile oder spröde Materialien handelt, da die Mechanismen die zu Entstehung und dem Fortschritt der Imperfektion führen, sich signifikant unterscheiden, je nachdem, ob diese in duktilem oder aber spröden Kontext ablaufen.

Es existieren auch Schädigungsmodelle bei denen sich der skalare Schädigungsparameter in beide Richtungen hin entwickeln – also sowohl zu- als auch abnehmen – kann. So ist beispielsweise die vorhandene Porosität in einem duktilen Metall als skalarer Schädigungsparameter interpretierbar. Die mikroskopisch kleinen Hohlräume, welche die Porosität quantifizierend erfasst, sind jedoch durch Deformationsvorgänge veränderbar bzw. können unter Umständen bei uniaxialem Druck ganz geschlossen oder durch Zugbelastung vergrößert werden. Es ist offensichtlich, dass diese Hohlräume die Steifigkeit sowie auch die induzierten Spannungen signifikant beeinflussen. Ein Plastizitätsmodell, welches die Porosität und somit auch eine Art Schädigung beschreiben soll, beinhaltet somit einen skalaren Schädigungsparameter, der in Form der Porosität sowohl zu- als auch abnehmen kann, was in Bezug zu den vorherigen Ausführungen ein weiteres wesentliches Unterscheidungsmerkmal darstellt. Anwendung finden diese Modelle (Gurson, 1977), (Gologanu, Leblond, & Devaux, 1993), (Kailasam, Aravas, & Ponte Castaneda, 2000) sehr häufig in der Umformtechnik beim Schmieden und Walzen sowie beim Tief- oder Streckziehen. Weitere Anwendungsgebiete sind die oberflächliche Verdichtung von pulvertechnologisch hergestellten porösen Sinterbauteilen, aber auch die Thermomechanik, bei der es in durch Temperaturlast zyklerten Reaktorbauteilen zu Mikrorisswachstum kommen kann.

Grundsätzlich weisen alle verschmierten Riss- und Schädigungsmodelle einen Nachteil auf, welcher in der lokalen Beschreibungsweise des verwendeten Ansatzes gegeben ist und der zudem zu problematischen Phänomenen führen kann. Es ist mathematisch beweisbar, dass sich der Typ des beschreibenden partiellen Differentialgleichungssystems bei quasistatischen Problemen von elliptisch zu hyperbolisch, bzw. bei dynamischen Problemen von hyperbolisch zu elliptisch ändert, wenn ein Übergang von verfestigenden zu entfestigenden Materialverhalten auftritt. Dieser Umstand ist die Ursache von Lokalisierungsphänomenen, unter denen man im Wesentlichen die Ausbildung sehr schmaler (lokaler) Versagenszonen versteht, die zudem durch hohe Verzerrungen charakterisiert sind. Daraus resultierend, muss im mathematischen Sinne von einem schlecht gestellten Randwertproblem ausgegangen werden. Der singuläre Charakter äußert sich darin, dass die Verzerrungen sich innerhalb einer Zone mit der Breite von null lokalisieren. Dieser Vorgang der Lokalisierung ist physikalisch nicht korrekt abgebildet und führt im Rahmen von numerischen Lösungsverfahren wie der Finiten-Elemente-Methode zu schlecht gestellten Gleichungssystemen, da die Breite der Lokalisierungszone und damit die Energiedissipation ebenfalls gegen null tendieren. Die berechneten Ergebnisse sind im Rahmen der Finiten-Elemente-Methode für den Bereich während und nach der Lokalisierung abhängig von der gewählten räumlichen Diskretisierung (Netzabhängigkeit der Lösung, vgl. Abschnitt 5 bzw. 5.2). In diesem Zusammenhang zeigen sich die gravierenden Nachteile von lokalen Plastizitätsmodellen, da sich die eben erwähnten Phänomene der Lokalisation bei den wesentlich komplexeren nichtlokalen Konstitutivgesetzen nicht zeigen (Pijaudier-Cabot & Bazant, 1987). Bei letzteren bleibt die Breite der Lokalisierungszone endlich, wobei die geometrische Ausdehnung des Lokalisationsbereichs im Wesentlichen durch eine intrinsische Länge determiniert ist (vgl. Abschnitt 3). Demzufolge bleiben auch die berechneten numerischen Lösungen relativ unabhängig von der gewählten räumlichen Diskretisierung.

Die experimentelle Beobachtung von Imperfektionen wie bspw. diskreten Rissen motiviert die Darstellung von Diskontinuitäten im Rahmen der diskreten Rissmodelle (II). Bei diesem Ansatz werden die

Auswirkungen der im Kontinuum eingebetteten Imperfektion auf seine Umgebung nicht auf das zugrundeliegende Konstitutivgesetz verschmiert. Vielmehr wird die Imperfektion als eigenständiges Objekt im beschreibenden gesamtheitlichen Ansatz gesondert erfasst. Zentrales Konzept diskreter Rissmodelle ist das eigenständige konstitutive Gesetz, das der Imperfektion zugeordnet wird. In diesem Zusammenhang ist es notwendig, den Begriff des Verschiebungssprungs einzuführen, der mit jeder Imperfektion assoziiert werden kann, wobei der Verschiebungssprung als der Abstand zweier zugeordneter gegenüberliegender materieller Punkte definiert ist. Mit Hilfe dieser Größe kann ein Konstitutivgesetz eingeführt werden, das die Versagenseigenschaften der Imperfektion durch eine Abhängigkeit der vorhandenen Spannungen von den lokalen Verschiebungssprüngen beschreibt. Diese Art der Definition des Konstitutivgesetzes impliziert die Annahme, dass die freien Oberflächen der Imperfektion innerhalb einer Prozesszone Spannungen übertragen können. Im restlichen, nicht von der Unstetigkeit beeinflussten Gebiet wird das Materialverhalten durch eine Spannungs-Dehnungsbeziehung charakterisiert.

Im Folgenden wird der Versuch unternommen, einen kleinen systematischen Überblick unter Verwendung einer willkürlichen Einteilung der im Laufe der Zeit entwickelten diskreten Rissmodelle zu geben, wobei sich diese Kategorisierung im Wesentlichen auf den eigentlichen Beschreibungsansatz, der numerischen Implementierung sowie der Finiten-Elemente-Formulierung stützt. Zudem beziehen sich die weiteren Ausführungen auf Rissmodelle, die eine spezifische Erscheinung des zuvor allgemein verwendeten Begriffs der Imperfektion darstellen.

Zur expliziten Beschreibung des konstitutiven Verhaltens von diskreten Rissmodellen wurde das sogenannte Kohäsivzonenmodell (Barenblatt, 1960), (Dugdale, 1960) eingeführt, wobei diese Darstellung als eine Art Ausgangspunkt angesehen werden kann, auf den ein Großteil der späteren Entwicklungen aufbauen, weshalb dieser Ansatz auch ein Konzept repräsentiert, das fast allen Modellen immanent ist. Die Grundidee dieses Konzepts ist die Einführung eines Kohäsivgesetzes, das die Spannungsübertragung an der Risspitze mit fortschreitender Rissöffnung beschreibt. Bei größer werdender Rissöffnung gehen die Spannungen die übertragen werden können, gegen null, was im Wesentlichen dem zuvor formulierten allgemeinen Ansatz des Konstitutivgesetzes diskreter Rissmodelle entspricht. Das Konzept ist universell und kann sowohl für spröde als auch bei duktilen Werkstoffen, wenngleich mit signifikant unterschiedlichen Eigenschaften, angewendet werden. Eng verwandt mit dieser Beschreibungsweise ist ein Modell, welches ein Kohäsivgesetz einführt, das die Zugfestigkeit des Werkstoffs und die Bruchenergie in Bezug auf ein Koordinatensystem charakterisiert, dessen Richtung durch die Rissflächennormalen determiniert ist, wobei dieses fiktive Rissmodell erstmals von (Hillerborg, Modeer, & Petersson, 1976) vorgeschlagen wurde. Da gezeigt werden kann, dass die Bruchenergie proportional zu einer intrinsischen Länge ist, entspricht es somit der allgemeinen Darstellung der Konstitutivgesetze von diskreten Rissmodellen, welche die Spannung als Funktion von Verschiebungssprüngen beschreibt.

In Bezug zur numerischen Umsetzung von diskreten Rissmodellen im Rahmen der Finiten-Elemente-Methode kam es zu Entwicklungen, die rein formal ebenfalls dem Ansatz zur Beschreibung von Kohäsivzonen entsprechen. In diesem Zusammenhang sind beispielsweise die sogenannten Interface-Elemente (Xu & Needleman, 1994) zu nennen. Die Wirkungsweise von Interface-Elementen kann mit Federn, die eine nichtlineare Beziehung zwischen den Knotenkräften und der Relativbewegung von zugeordneten Knoten definieren, verglichen werden. Die Elemente besitzen eine Ausgangsdicke von null und werden zwischen den Elementflächen der Kontinuumelemente platziert, womit dieser Ansatz sehr eng mit den klassischen Kohäsivzonenelementen verwandt ist, welche jedoch im Allgemeinen eine endliche, wenn auch nur sehr kleine Elementdicke aus numerischen Gründen besitzen. In diesem Zusammenhang ist jedoch eine Problematik sofort erkennbar, welche sich im Allgemeinen auf den unbekannten und sich einstellenden sowie vom Spannungszustand abhängigen Risspfad bezieht. Da der Risspfad nur durch das diskrete, im Ausgangszustand flächige Element zwischen den Kontinuumelementen abgebildet wird, kann sich dieser nur innerhalb der Interface- oder Kohäsivzonenelemente ausbreiten, wobei der Risspfad mittels dieser Ansätze durch die Diskretisierung beeinflusst bzw. vorgegeben ist. Streng genommen ist somit die Anwendung von Interface- oder Kohäsivzonenelementen bei Problemen sinnvoll, bei denen der Risspfad a priori bekannt ist, was bei der in dieser Arbeit genauer untersuchten Grenzflächendelamination von dünnen duktilen metallischen Schichten auf spröden Substraten erfüllt ist. Zudem kann bei lokal sehr fein aufgelösten Diskretisierungen der Risspfad in erster Näherungen ebenfalls grob abgeschätzt werden, was für qualitative sowie prinzipielle Aussagen für ein zu untersuchendes Gesamtsystem im Allgemeinen auch völlig ausreichend sein sollte. Da es aber oft nicht möglich ist, den gesamten Bereich, in dem der Rissfortschritt untersucht werden soll, sehr fein zu vernetzen, wurden sogenannte Neuvernetzungs-techniken (remeshing techniques) vorgeschlagen (Swendson & Ingraffea, 1988), (Bouchard, Bay, Chastel, & Tovina, 2000). Die Vorgehensweise der Neuvernetzung (Maligno,

Rajaratnam, Leen, & Williams, 2010) ist vor allem bei kritischen industrierelevanten Problemen (Timbrell, Chandwani, & Maligno, 2011) weit verbreitet und wird auch kommerziell in verschiedenen hochkomplexen Softwaretools (Zencrack Software, 2011) ständig weiterentwickelt. Diese speziellen Softwaretools sind meist an weit verbreitete kommerzielle FEM-Programmsysteme wie ABAQUS oder ANSYS gekoppelt und stellen im Wesentlichen die eigentliche Neuvernetzungsstrategie bezüglich des Rissfortschritts zur Verfügung, welcher wiederum auf den berechneten Spannungs- bzw. Deformationszuständen der FEM-Programme sowie dem in der Diskretisierung abgebildeten geometrischen Rissfortschrittzustand basiert. Dieses Konzept der Neuvernetzung ermöglicht es, die Simulation mit unverzerrten Netzen fortzuführen. Nachteile der Neuvernetzungsverfahren liegen in der Komplexität der Implementierung und der zeitaufwändigen Berechnung.

Als weiteres Kategorisierungsmerkmal der diskreten Rissmodellierung kann die sogenannte Elementformulierung herangezogen werden. Da ein Riss als mathematische Unstetigkeit im Deformationszustand darstellbar ist, kann diese Diskontinuität entweder durch das vorliegende Verzerrungsfeld oder durch das vorhandene Verschiebungsfeld beschrieben werden. Da die Verzerrungen im Wesentlichen erste Ableitungen von Verschiebungen darstellen, folgt aus einem Verzerrungssprung unmittelbar ein stetiges, aber nicht mehr stetig differenzierbares Verschiebungsfeld, weshalb man bei Ansätzen durch Verzerrungssprüngen von schwachen Diskontinuitäten (weak discontinuities) spricht. Da sich durch diese Beschreibung die Stärke der Diskontinuität abschwächt, kann dieser Ansatz auch in der zuvor beschriebenen Lokalisierungsproblematik von verschmierten Rissmodellen verwendet werden, um bspw. die Auflösung zur Darstellung von Scherbändern im Rahmen der FEM zu verbessern (Ortiz, Leroy, & Needleman, 1987), (Belytschko, Fish, & Engelman, 1988). Elementformulierungen mit einem Sprung im Verschiebungsfeld werden innerhalb der diskreten Rissmodellierung üblicherweise als starke Diskontinuitäten (strong discontinuities) und folglich auch als Verschiebungsdiskontinuitäten bezeichnet. In der Vielzahl von Elementformulierungen mit Verschiebungsdiskontinuitäten ist ein neuerer besonders eleganter und vielversprechender Ansatz die sogenannte xFEM (eXtended Finite Element Method) (Belytschko & Black, 1999). Stark vereinfacht dargestellt, wird bei diesem Ansatz die Diskontinuität durch einen zusätzlichen erweiterten Ansatzterm im Verschiebungsfeld innerhalb des Gesamtproblems eingebettet, was auch als Anreicherung der Verschiebungsfeld Darstellung (enriched approach) interpretiert werden kann. D. h., den innerhalb der Standard-FEM angesetzten stetigen Verschiebungsfeldansatzfunktionen wird ein weiterer Term, der eine Diskontinuität abbilden kann, überlagert, wobei dieser erweiterte bzw. angereicherte Anteil nur dann aktiv in die Elementformulierung miteinbezogen wird, wenn ein Riss in dem entsprechenden Bereich präsent bzw. aktiv ist. Dadurch ist es möglich, den diskreten Riss direkt innerhalb eines Elements selbst abzubilden, wodurch der Risspfad nicht mehr auf kohäsive Zonen zwischen den Elementen beschränkt ist, sondern sich frei im gesamten diskretisierten Raum ausbilden kann. Eng mit der xFEM ist die sogenannte Partition-of-Unity-Methode (PUM) (Melenk & Babuska, 1996), (Babuska & Melenk, 1997) verknüpft, welche das Fundament für die xFEM darstellt. Die xFEM bietet zwar große Vorteile gegenüber den klassischen Interface- oder Kohäsivzonenenelementen, jedoch auch Nachteile. Ein zentraler Aspekt ist in der Notwendigkeit gegeben, zusätzliche Knoten einzuführen, welche an die Ansatzfunktion der Diskontinuität gekoppelt sind, und diese entsprechend determinieren. Durch diese zusätzlichen Knoten werden weitere Freiheitsgrade ins System eingeführt, welche die Auswertung der Elementsteifigkeitsmatrizen sehr komplex und umfangreich gestalten können. Zudem ist es für eine effiziente Lösung des Gesamtproblems erforderlich, den diskontinuierlichen angereicherten Anteil der Verschiebungsansatzfunktionen nur dann ins resultierende Gesamtgleichungssystem aufzunehmen, wenn dies lokal erforderlich ist, also wenn an dem Ort überhaupt Diskontinuitäten in Form von Rissen vorhanden sind. Daraus resultiert wiederum, dass während der Lösung des Rissproblems die Anzahl der Freiheitsgrade nicht gleichbleibend ist, sondern mit der Rissevolution ansteigt. Dies kann ähnlich wie bei Kontaktproblemen zu Schwierigkeiten im Iterationsprozess führen weshalb spezielle oder modifizierte Algorithmen bei der numerischen Lösung zum Einsatz kommen müssen. Außerdem ist die numerische Integration der diskontinuierlichen Formfunktionen, welche die schwache Form des beschreibenden partiellen Differentialgleichungssystems erforderlich macht, wesentlich aufwändiger und komplexer umzusetzen sowie im Allgemeinen nicht mit üblichen Integrationsverfahren nach Gauss oder Newton-Cotes in der gewünschten Genauigkeit darzustellen.

Zudem können in allen bekannten Softwaresystemen die das xFEM-Konzept bereitstellen, keine benutzerdefinierten Elemente mit diesem Verfahren gekoppelt werden. Da im Rahmen dieser Arbeit nichtlokale Gradiententheorien für die Beschreibung des mikromechanisch-motivierten Materialverhaltens zum Einsatz kommen, müssen adäquate benutzerdefinierte Elemente wegen der darzustellenden Verzerrungsgradienten entwickelt werden, was die Verwendung der zur Verfügung stehenden xFEM-

Implementierung innerhalb des verwendeten Softwaresystems nicht vorsieht bzw. ermöglicht. Eine Lösung wäre zwar, die xFEM in einem eigenen benutzerdefinierten Element zu implementieren, was aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Deshalb wurden klassische Kohäsivzonenelemente zur Beschreibung von Rissen verwendet, deren zentrale Bausteine nachfolgend dargestellt werden.

2.5.1 Kohäsivzonenmodell

Die folgende Darstellung des Versagensverhaltens mit Hilfe des Kohäsivzonenmodells kann exemplarisch für eine Beschreibung von diskreten Modellen zur Erfassung degenerativen Werkstoffverhaltens angesehen werden, da alle prinzipiellen Bausteine darin enthalten sind. Wie bereits erwähnt, besteht das Kohäsivzonenmodell aus zwei Bausteinen

- I. Versagenskriterium: Dieses quantifiziert die Belastungs- bzw. Deformationszustände und erfasst die Bedingungen, die erfüllt sein müssen, damit ein Versagen überhaupt eintreten kann. Es entspricht in einer analogen Darstellung zur Plastizität dem Fließkriterium, welches die Bedingungen erfasst damit bleibende inelastische Deformationen überhaupt auftreten können.
- II. Versagensevolution: Darunter versteht man das Gleichungssystem, welches den Fortschritt des Versagens (bspw. Schädigung) beschreibt, wenn das Versagenskriterium zuvor erfüllt wurde. In einer analogen Darstellung zur Plastizitätstheorie entspricht die Versagensevolution den Evolutionsgleichungen, welche die Größe und Richtung der bleibenden inelastischen Deformationen im Dehnungsraum beschreiben. Bei Rissen hängt dieser Versagensfortschritt stark davon ab, welche Belastungsmoden dominant sind oder ob es sich um sogenannte „Mixed-Mode“ Lastmuster handelt. Es sei explizit darauf verwiesen, dass bei Kohäsivzonenelementen (meist) nur die Änderung eines skalaren Schädigungsparameters aus den Evolutionsgleichungen bestimmt werden muss, und nicht die Richtung des Rissfortschritts selbst, da diese durch die räumliche Lage des Elements schon festgelegt ist. Somit kann der Schädigungsparameter als analoge Größe zum plastischen Inkrement beim Fließen angesehen werden, wobei die Evolution des Schädigungsparameters eine nach oben durch 1 beschränkte Größe darstellt, da eine bereits gebrochene Bauteilzone nicht noch weiter geschädigt werden kann.

Diese beiden Bausteine beschreiben im Zusammenwirken mit den konstitutiven Gleichungen das Versagensverhalten der kohäsiven Zone. Dabei wird das Konstitutivgesetz meist als „Traction-Separation-Law“ (TSL) bezeichnet, da es die durch den Riss verursachten Verschiebungssprünge (Separationen) der gegenüberliegenden Basisflächen mit den daraus resultierenden Spannungen verknüpft. Um die Kinetik des Kohäsivzonenelements sinnvoll zu beschreiben, wird eine Bezugsebene definiert, die genau durch die Mitte des Kohäsivzonenelements verläuft und exakt zwischen deren beiden Basisflächen liegt. Das lokale rechtwinkelige Koordinatensystem ist so ausgerichtet, dass eine lokale Koordinatenrichtung \vec{n} parallel zum Normalenvektor der Bezugsebene gerichtet ist und die beiden anderen lokalen Koordinatenrichtungen \vec{s} bzw. \vec{t} in der Bezugsebene liegen. Somit wird die Separation durch eine normale und zwei tangentielle Komponenten dargestellt. Es ist naheliegend, die Verschiebungssprünge bzw. den Separationsvektor über die Differenz der Verschiebungen bezüglich der beiden Basisflächen des Kohäsivzonenelements zu definieren, wobei sich die Komponenten des Verschiebungsfeldes auf das lokale Koordinatensystem des Kohäsivzonenelements beziehen.

$$(\delta_n \quad \delta_s \quad \delta_t) := ({}^2u_n \quad {}^2u_s \quad {}^2u_t) - ({}^1u_n \quad {}^1u_s \quad {}^1u_t) \quad (\text{Rel. 2-188})$$

In diesem Zusammenhang ist es üblich, die Verschiebungssprünge auf die relativ geringe, aber endliche Ausgangsstärke T_0 des Kohäsivzonenelements

$$(\varepsilon_n \quad \varepsilon_s \quad \varepsilon_t) := \frac{1}{T_0} \cdot (\delta_n \quad \delta_s \quad \delta_t) = \left(\frac{\delta_n}{T_0} \quad \frac{\delta_s}{T_0} \quad \frac{\delta_t}{T_0} \right) \quad (\text{Rel. 2-189})$$

zu beziehen. Der auf die Stärke des Kohäsivzonenelements bezogene Separationsvektor stellt somit eine Art Quasi-Verzerrungsvektor dar. Damit kann das zumeist linear formulierte reine versagensfreie konstitutive Verhalten der Spannungen $(\bar{\varepsilon}_n, \bar{\varepsilon}_s, \bar{\varepsilon}_t)$ im Rahmen eines TSL folgendermaßen definiert werden,

$$\begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_n \\ \bar{\varepsilon}_s \\ \bar{\varepsilon}_t \end{pmatrix} := \begin{bmatrix} K_{nn} & K_{ns} & K_{nt} \\ K_{ns} & K_{ss} & K_{st} \\ K_{nt} & K_{st} & K_{tt} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_n \\ \varepsilon_s \\ \varepsilon_t \end{pmatrix} \quad (\text{Rel. 2-190})$$

wobei in nichtlinearen Formulierungen die Koeffizienten K_{ij} vom Quasi-Verzerrungsvektor ε_i abhängen können. Die Nichtlinearität des Versagensverhaltens ist dann durch die Evolution des skalaren Schädigungsparameters gegeben. Es ist in Analogie zum Elastizitätsgesetz unmittelbar einsichtig, dass die Koeffizienten K_{ij} Steifigkeiten darstellen, welche so groß wie möglich sein sollten, um geringe bzw. zu vernachlässigende Auswirkungen auf das Gesamtsystem zu haben, in das die Kohäsivzonenelemente eingebettet sind. Aus numerischen Gründen darf die Steifigkeit nicht zu groß gewählt werden, da dies sonst zu Konvergenzproblemen führen kann. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass der Ansatz, im Kohäsivzonenelement ein Konstitutivgesetz einzuführen, das im ungeschädigten Zustand große Steifigkeiten aufweist, einer Penaltybeschreibung äquivalent ist, wie diese bspw. beim „Stick and Slip“ des Reibungsverhaltens im Rahmen der Kontaktmechanik (Wriggers, 2002), (Laursen, 2002) Verwendung findet. Es wäre auch möglich, diese endliche Steifigkeit durch ein ideal starres Verhalten zu beschreiben. Dies macht jedoch die Einführung von Lagrangeschen Multiplikatoren erforderlich und ist wegen der zusätzlichen Freiheitsgrade mit einer aufwändigeren Behandlung des Gesamtsystems verbunden. Ein analoges Vorgehen existiert auch im erwähnten Bereich der Kontaktmechanik (Pietrzak & Curnier, 1999).

Das Versagenskriterium wird üblicherweise durch die höchstmöglich auftretenden Spannungen $({}^0t_n, {}^0t_s, {}^0t_t)$ oder aber mit den maximal zulässigen Separationen bzw. Quasi-Verzerrungen $({}^0\varepsilon_n, {}^0\varepsilon_s, {}^0\varepsilon_t)$ beschrieben. Dabei werden im Allgemeinen sowohl die normale als auch die beiden tangentialen Richtungen im gewählten Ansatz simultan (mixed-mode) berücksichtigt:

$$f(t_n, t_s, t_t; {}^0t_n, {}^0t_s, {}^0t_t) \leq 0 \Leftrightarrow g(\varepsilon_n, \varepsilon_s, \varepsilon_t; {}^0\varepsilon_n, {}^0\varepsilon_s, {}^0\varepsilon_t) \leq 0 \quad (\text{Rel. 2-191})$$

Es ist naheliegend, dass sich ein Riss unter gleichzeitiger Scher- und Zugbelastung eher bilden wird, als wenn nur isolierte Scherspannungen vorliegen. Damit ist ein Ansatz zur Berücksichtigung gemischter Lastmoden gegeben, was in weiterer Folge eine wichtige Rolle für die Modellierung spielt. Zudem beschreiben die Größen (t_n, t_s, t_t) und $(\varepsilon_n, \varepsilon_s, \varepsilon_t)$ den mechanischen Belastungszustand unter Miteinbeziehung eines möglicherweise präsenten Versagens. Ist das Versagenskriterium kleiner null, so liegen Belastungszustände vor, die keine Schädigung verursachen. Wird hingegen das Versagenskriterium größer oder gleich null, so ist durch die mechanischen Zustände das Material überlastet und es entwickelt sich ein Versagen. Analog zur Plastizität können sich die Größen $({}^0t_n, {}^0t_s, {}^0t_t)$ und $({}^0\varepsilon_n, {}^0\varepsilon_s, {}^0\varepsilon_t)$, welche die Grenzen des Versagensfortschritts repräsentieren, auch wiederum in Abhängigkeit der Schädigung bzw. Belastungsgeschichte entwickeln. In den meisten Ansätzen sind diese jedoch konstante Parameter.

Der Versagensvorgang selbst wird dann durch die Beschreibung der Entwicklung eines skalaren Versagens- bzw. Schädigungsparameters D quantifiziert. Dieser reduziert sowohl die in der kohäsiven Zone resultierenden Spannungen (vgl. Bild 2-43) als auch die Steifigkeiten (strichlierte Linie in Bild 2-43), wobei für die Normalkomponente zumeist nur Zugbelastungen eine Verringerung verursachen und vorhandene Drucklasten durch das Versagen nicht beeinflusst werden:

$$t_n := \begin{cases} (1-D) \cdot \bar{t}_n & \bar{t}_n \geq 0 \\ \bar{t}_n & \bar{t}_n < 0 \end{cases} \quad \bar{t}_s := (1-D) \cdot t_s \quad \bar{t}_t := (1-D) \cdot t_t \quad (\text{Rel. 2-192})$$

Wie bereits erwähnt, stellt der Parameter D eine von 0 bis 1 monoton wachsende Größe dar, womit bestimmte Anforderungen an die Evolutionsgleichungen gestellt werden. Um den skalaren Versagensparameter mit den Separationen (Verschiebungssprüngen) in Beziehung zu stellen, ist es nützlich, eine effektive Separation (Camanho & Davila, 2002) zu definieren, die im Wesentlichen eine Norm des Separationsvektors darstellt:

$$\delta_m := \sqrt{\delta_n^2 + \delta_s^2 + \delta_t^2} \quad (\text{Rel. 2-193})$$

Stellt man die sich in der kohäsiven Zone einstellenden Spannungen als Funktion der Separationen dar (Bild 2-43), so ist ersichtlich, dass die Fläche unter dieser Kurve eine spezifische Bruch- bzw. Rissenergie repräsentiert.

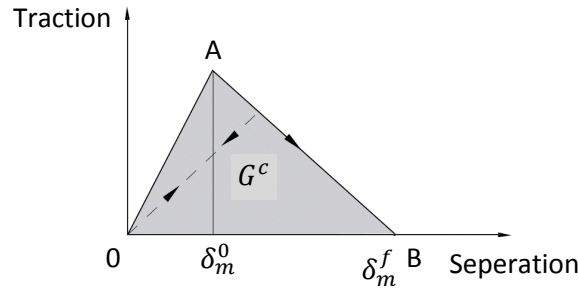


Bild 2-43: Exemplarisches TSL mit einfacher linearer Versagensparameterrevolution

Diese Größe ist auch von den Einheiten her als eine Art Rissenergie interpretierbar, welche auf die freie Rissoberfläche bezogen ist, wobei diese Größe eine bestimmte Rolle zur Erfassung von Größen wie bspw. D unter mixed-mode Belastung spielt.

Im Zusammenhang mit der Schädigungsevolution ist es unmittelbar einsichtig, dass der Versagensfortschritt wie auch das zugeordnete Kriterium, von den dominanten Belastungsmoden, die im Allgemeinen in gemischter Form auftreten, stark beeinflusst wird (mixed-mode). Um diesen Mixed-Mode Zustand zu quantifizieren, gibt es verschiedene Ansätze, wobei nachfolgend die wichtigsten zwei in aller Kürze dargestellt sein sollen.

Ein Ansatz basiert auf den Rissenergien in normaler Richtung G_n und tangentialer Richtung G_s bzw. G_t , wobei der Mixed-Mode durch die Quotienten aus den richtungsbezogenen Anteilen in Relation zur summarischen Gesamtenergie G_T aller Bezugsrichtungen definiert ist:

$$m_1 := \frac{G_n}{G_T} \quad m_2 := \frac{G_s}{G_T} \quad m_3 := \frac{G_t}{G_T} \quad ; \quad G_T := G_n + G_s + G_t \quad (\text{Rel. 2-194})$$

Aus der Definition (Rel. 2-194) geht hervor, dass nur zwei der drei Parameter m_i unabhängig voneinander sind. Einer von diesen ist stets dadurch gegeben, dass die Summe aller drei 1 sein muss, was aus der Definition (Rel. 2-194) unmittelbar folgt.

Ein anderer Ansatz geht von den unterschiedlichen Winkeln aus, welche die Spannungskomponenten in der kohäsiven Zone je nach vorliegendem Belastungsmuster einnehmen können. Diese Winkel werden auf Größen zwischen 0 und 1 normiert, was durch den Vorfaktor in den Definitionen (Rel. 2-195) ersichtlich ist:

$$\phi_1 := \frac{2}{\pi} \cdot \tan^{-1} \frac{\tau}{\langle t_n \rangle} \quad \phi_2 := \frac{2}{\pi} \cdot \tan^{-1} \frac{t_t}{t_s} \quad ; \quad \tau := \sqrt{t_s^2 + t_t^2} \quad (\text{Rel. 2-195})$$

Die Definitionen (Rel. 2-195) sind anhand der im Bild 2-44 dargestellten Gegebenheiten leicht nachvollziehbar. Es können jedoch auch noch andere sinnvolle Größen definiert werden, die den Mixed-Mode-Zustand in brauchbarer Weise festlegen. Die rissenergiebasierten und spannungsbezogenen Mixed-Mode-Ansätze können jedoch bei ein und demselben vorgegebenen Belastungsmuster unter Umständen stark unterschiedliche Werte liefern. Grundsätzlich muss in diesem Zusammenhang erwähnt werden, dass es wichtig ist, welche Mechanismen und dominanten Größen am Versagen im betrachteten Werkstoff bzw. System beteiligt sind, woraus wiederum eine sinnvolle Anwendung der Mixed-Mode-Quantifizierung folgt.

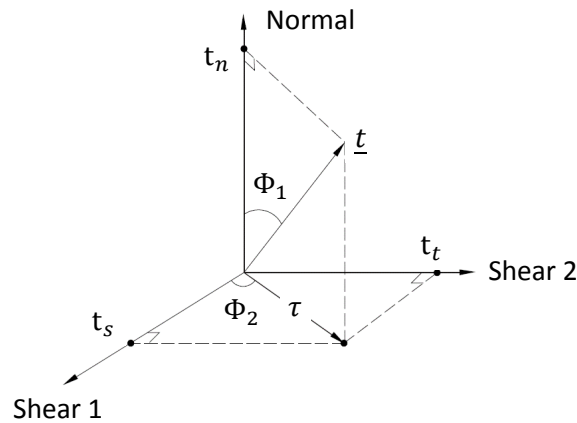


Bild 2-44: Spannungsbezogene Mixed-Mode-Definition

Aus den Definitionen von Mixed-Mode-Zuständen können für verschiedene Belastungsmuster experimentell Schädigungsparameter bestimmt und tabellarisch erfasst werden. Jeder Lastmodus ist eindeutig durch die Mixed-Mode-Definitionen (Rel. 2-194) und (Rel. 2-195) quantifizierbar und kann zu dem versuchstechnisch ermittelten Versagensparameter in Bezug gesetzt werden.

Die Entwicklung des skalaren Versagensparameters D ist nicht nur von den vorliegenden Belastungsmoden abhängig, sondern auch vom Zustand der vorliegenden Deformation bzw. dessen Geschichte. Dieser sich in der kohäsiven Zone einstellende Deformationszustand wird durch das TSL beschrieben und kann entweder durch die Separationen oder aber auch durch die damit verknüpften Rissenergien dargestellt werden. Beide Darstellungen sind einander äquivalent, da die energetische Abhängigkeit durch die Integration des TSL in der separationsabhängigen Form berechnet werden kann (Fläche unter dem in Bild 2-43 dargestellten und von der Separation abhängigen Spannungsverlaufs).

Damit kann zur Darstellung des Versagens- bzw. Schädigungsparameters zusammenfassend Folgendes festgehalten werden. Der Schädigungsparameter hängt einerseits vom Mixed-Mode und andererseits auch von dem mechanischen Deformations- bzw. Belastungszustand sowie dessen Geschichte in der kohäsiven Zone ab. Dabei kann die Darstellung des Mixed-Modes entweder energie- oder aber spannungsbasiert erfolgen und die Beschreibung der Abhängigkeit vom versagensbeeinflussten mechanischen Belastungszustand ist entweder durch die Separationen oder durch die entsprechenden spezifischen Rissenergien möglich. Exemplarisch seien nachfolgend diese skalaren Versagensabhängigkeiten in deren allgemeinen Form zusammenfassend dargestellt:

$$\begin{aligned} D &:= {}^m_{\delta}d(\delta_m, m_i; {}^o\delta_m) & D &:= {}^{\phi}_{\delta}d(\delta_m, \phi_i; {}^o\delta_m) \\ D &:= {}^m_Gd(G_j, m_i; {}^oG_k) & D &:= {}^{\phi}_Gd(G_j, \phi_i; {}^oG_k) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 2-196})$$

Grundsätzlich kann festgehalten werden, dass die Erfassung des Versagens durch analytische Ansätze erfolgen kann, wie bspw. durch Linear-, Potenz- oder Exponentialfunktionen. Dies gilt sowohl für die Abhängigkeit vom Mixed-Mode als auch für die Separation bzw. der damit verknüpften Rissenergie, welche letztendlich den mechanischen Belastungs- bzw. Deformationszustand festlegen. Als Beispiele seien in diesem Zusammenhang das Potenzgesetz oder aber auch der Ansatz nach (Benzeggagh & Kenane, 1996) für die Mixed-Mode-Formulierung genannt. Für die explizite Separations- bzw. die damit verknüpfte Rissenergieabhängigkeit des Versagens findet eine rein lineare oder rein exponentielle Schädigung (Entfestigung) sehr oft praktische Anwendung.

Abschließend sei noch auf ein im Rahmen der impliziten Finiten-Elemente-Methode wichtiges Problem verwiesen, das besonders bei lokal entfestigenden Materialverhalten auftritt. Dabei handelt es sich um Konvergenzprobleme, die beim unstetigen Übergang zur einsetzenden Schädigung auftreten können. Diese rein numerischen Probleme sind oft durch einen regularisierenden Ansatz unter zusätzlicher Einführung viskoser Eigenschaften zu beheben, wie in Abschnitt 2.3.1.3 bereits detailliert beschrieben. Es ist aus der Struktur der viskosen Anteile im konstitutiven Verhalten zu sehen, dass diese im Allgemeinen einen stetigen Übergang der problematischen Funktionsbereiche bewirken, die speziell und meist bei einsetzendem Versagen auftreten. Allerdings muss die Parametrisierung für diese viskose Regularisierung (vgl. Abschnitt 2.3.1.3) entsprechend gewählt werden, um den künstlich miteingeführten Einfluss von den Deformationsgeschwindigkeiten nicht zu groß werden zu lassen. Andererseits darf dieser künstliche Anteil auch nicht zu klein sein, da sonst keine ausreichende lokale Regularisierung der funk-

tionalen Abhängigkeiten vorliegt, um die Konvergenzprobleme zu beseitigen. Die Wahl dieser Parameter ist stark problemabhängig und ist ein nicht unwesentlicher Ansatz zur praktischen numerischen Berechnung von komplexen Aufgabenstellungen, wie dies im Unterkapitel 5.3 im Zusammenhang mit Abschnitt 5.2 zu sehen ist. Die Verifikation über den integralen Einfluss der viskosen Regularisierungsanteile auf das Gesamtproblem kann dabei über die dissipierten Energien der deformationsgeschwindigkeitsabhängigen Anteile in Relation zur Gesamtenergie oder aber auch zur Verzerrungs- sowie auch plastisch dissipierten Energie erfolgen. Grundsätzlich können bei Erfüllung der zuletzt genannten Kriterien trotzdem noch lokal etwas verstärkte Einflüsse auftreten, was aber nur dann der Fall sein kann, wenn sich die Deformationsvorgängen lokal sehr unterschiedlich stark verteilen und entsprechend große Inhomogenitäten in Bezug auf Verformungsgeschwindigkeiten vorhanden sind. Da diese Umstände bei den experimentell und numerisch untersuchten Problemen nicht vorliegen, ist das globale Kriterium für die Verifikation des viskosen Einflusses ausreichend.

3 Plastizitätsmodelle mit Verzerrungsgradienten

Bei den meisten metallischen Werkstoffen sind die Bewegungen von Versetzungen der dominante Mechanismus für bleibende plastische Deformationen. Die Eigenschaft der Versetzungsbewegung kann auf der Mikroskala der Kristallebene mittels relativ einfacher und überschaubarer Theorien ausreichend gut quantitativ beschrieben werden (siehe Abschnitt 2.2.2.1). Die schwerpunkthaft in dieser Arbeit verwendete Theorie mit der Bezeichnung „Mechanism Based Strain Gradient Plasticity Theory“ (Gao, Huang, Nix, & Hutchinson, 1999) verwendet einen Mehrskalenansatz. Das bedeutet, dass es sich bei dieser Vorschrift zwar um ein phänomenologisches Konstitutivgesetz der Kontinuumsmechanik handelt, das Modell aber selbst über Homogenisierungsansätze aus beschreibenden Ansätzen von Kristallzuständen auf der Mikroskala (siehe Abschnitt 2.3) abgeleitet worden ist. Dieses Modell steht in Beziehung zu klassischen und rein phänomenologischen Konstitutivgesetzen der Kontinuumsmechanik. Zum besseren Verständnis ist es daher zweckmäßig diese Theorie im Kontext anderer Modelle zu betrachten, welche im Folgenden etwas näher vorgestellt und beschrieben werden. Dabei handelt es sich im Wesentlichen um die „Couple-Stress Theory“ (Fleck & Hutchinson, 1993) und um die „Strain Gradient Plasticity Theory“ (Fleck & Hutchinson, 1997), die mit der in dieser Arbeit angewendeten „Mechanism Based Strain Gradient Plasticity Theory“ eng in Zusammenhang stehen. Zudem werden in der „Mechanism Based Strain Gradient Plasticity Theory“ oftmals auf Größen und Ansätze zurückgegriffen, welche bereits in den beiden anderen Modellen eine zentrale Rolle spielen.

Ausgangspunkt stellen die Theorien aus den 1960er Jahren des vorigen Jahrhunderts dar, in welchen erstmals im Rahmen elastischen Deformationsverhaltens sogenannte Gradientenmodelle von (Koiter, 1960), (Koiter, 1964), (Toupin, 1962), (Mindlin, 1963), etc. eingeführt worden sind.

Um eine übersichtliche und nachvollziehbare Darstellung der Zusammenhänge zwischen den Theorien zu geben, wurden in den nachfolgenden Abschnitten sämtliche Modelle im Rahmen kleiner Deformationen formuliert. Dadurch sind nach dem Prinzip der materiellen Objektivität keine von der Konfiguration unabhängigen Ratenformulierungen erforderlich, da die Referenz- und Momentankonfiguration zusammenfallen. Daraus resultiert, dass keine objektiven Zeitableitungen nach Lie, Oldroyd, Jaumann, aber auch die bei finiten Element Programmen oft verwendeten Raten nach Green-Naghdi-McInnis (Doghri, 2000) oder Green-McInnis (Haupt, 2000), verwendet werden müssen (vgl. Abschnitt 2.1.4). Deshalb können die ratenabhängigen Formulierungen mittels objektiver Zeitableitungen direkt durch Differentiationen nach der Zeit ersetzt werden. Diese Vereinfachungen haben allerdings keine Auswirkungen auf die wesentlichen Ansätze bzw. Prinzipien innerhalb der Modelle die den Theorien zugrunde liegen, da in den Abschnitten hauptsächlich die Zusammenhänge sowie Unterschiede zwischen den Beschreibungsweisen hervorgehoben werden sollen.

Der zentrale Aspekt aller in diesem Abschnitt vorgestellten Modelle ist durch die Versetzungsbeschreibung in Zusammenhang mit den bei plastischen Deformationen vorliegenden Verzerrungen und insbesondere mit den daraus resultierenden Verzerrungsgradienten gegeben. Dabei wird als grundlegende Größe die sogenannte Versetzungsdichte verwendet, welche im Abschnitt 2.2.2.1 eingeführt worden ist. Wie bereits erwähnt, werden plastische Verformungen bei Metallen meist hauptsächlich durch Bewegung der Versetzungen innerhalb eines Kristalls bzw. Korns ermöglicht, was aber nicht bedeutet, dass auch andere Mechanismen wie bspw. das Abgleiten von Korngrenzen usw. beteiligt sein können. Bei sehr kleinen Bauteilen, deren geometrische Ausdehnungen in Größenordnungen liegen, welche mit den Objektgrößen vergleichbar sind, die die Mikrostruktur des Werkstoffs determinieren, stellen Versetzungsbewegungen den alles dominierenden Mechanismus dar. Da es sich bei den in dieser Arbeit untersuchten Strukturen um sehr dünne, nur wenige hundert Nanometer starke, metallische Schichten handelt, ist die plastische Deformation primär durch Versetzungsbewegungen im Kristall bestimmt, was in Übereinstimmung mit den eben erwähnten Voraussetzungen zur plastischen Deformation steht.

Betrachtet man ein beliebiges Volumenelement, so ist der fundamentale Ansatz aller in diesem Abschnitt vorgestellten Plastizitätsmodelle durch die Unterscheidung zwischen zwei Kategorien von Versetzungsdichten in dem zu beschreibenden Bereich gegeben:

- I. Statistisch verteilte Versetzungsdichte ρ_s : Hierbei handelt es sich, wie der Name andeutet, um zufällig verteilte und aus dem Herstellungsprozess (Phasenübergang, Erstarrung, Wärmebehandlung, etc.) resultierende Versetzungen, die in praktisch jedem metallisch kristallin aufgebauten Material vorhanden sind. Stellt man sich einen idealen Zugversuch vor, so liegen in diesem Belastungsfall keinerlei Gradienten im plastischen Verzerrungsfeld vor, da das vorhanden

Verschiebungsfeld aufgrund der homogenen Belastung über den gesamten Bereich konstant ist. Dennoch verformt sich der Körper ab einer bestimmten Belastungsgrenze plastisch, was durch die Bewegung der vorhandenen statistisch verteilten Versetzungen ermöglicht wird. Da bei steigender plastischer Deformation und bei gleichzeitig verfestigendem Materialverhalten eine wachsende Anzahl von Versetzungen bewegt werden müssen, ist es naheliegend, die statistisch verteilte Versetzungsdichte ρ_s durch die 2. Invariante des Deviators vom infinitesimalen Verzerrungstensor ε_{ij} (Rel. 2-14) zu quantifizieren (von Mises Verzerrungsinvariante). Dieser Ansatz ist auch als die Berechnung einer skalaren effektiven Verzerrung aus der zugeordneten tensoriellen Größe ε_{ij} interpretierbar, wobei diese effektive Größe wiederum der statistisch verteilten Versetzungsdichte ρ_s zugeordnet wird:

$$\varepsilon_e := \sqrt{\frac{2}{3} \cdot \varepsilon'_{ij} \cdot \varepsilon'_{ij}} \quad \text{mit} \quad \varepsilon'_{ij} := \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \cdot \varepsilon_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 3-1})$$

Diese Annahme wird dadurch weiter gestützt, dass bei verfestigendem Materialverhalten für jede zusätzlich zu bewegendende Versetzung die äußere Belastung erhöht werden muss, da die zur Versetzungswanderung notwendige Schubspannung fix durch das Taylor Modell (vgl. Abschnitt 2.2.2.1 „Versetzungen“) vorgegeben ist.

Bei dem in der Praxis zumeist beobachtbaren inkompressiblen plastischen Materialverhalten kann der zur Bestimmung der 2. Invarianten verwendete Verzerrungsdeviator ε'_{ij} durch den Verzerrungstensor ε_{ij} ersetzt werden.

- II. Geometrisch notwendige Versetzungsdichte ρ_g : Diese Kategorie der Versetzungsdichte kann direkt den Gradienten der plastischen Verzerrungen zugeordnet werden. Um Änderungen im kontinuierlichen plastischen Verzerrungsfeld innerhalb der diskreten Kristallstruktur des Metalls aufzunehmen, ist offensichtlich eine entsprechende Anzahl von Versetzungen notwendig, weshalb die einleitende Aussage unmittelbar einsichtig sein sollte. Die im betrachteten Volumen notwendige Versetzungsanzahl ist wiederum mit der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g verknüpft (vgl. Abschnitt 2.2.2.1). Die aus den vektoriellen Deformationen resultierenden Verdrehungen bzw. Rotationen (Winkel) θ_i sind mittels des räumlichen Rotationsoperators $e_{ijk} \cdot \partial/\partial x_j$ determinierbar:

$$\theta_i = \frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \quad (\text{Rel. 3-2})$$

Aus Gleichung (Rel. 3-2) kann gefolgert werden, dass es zweckmäßig ist den Verschiebungsvektor für die Quantifizierung der (Ver)Drehwinkel zu verwenden, da dieser noch sämtliche Starrkörperrotationen bzw. Starrkörperverschiebungen enthält. Da nach den vorherigen Ausführungen die geometrisch notwendigen Versetzungen bzw. deren Dichten mit dem plastischen Verzerrungen in engem Zusammenhang stehen, ist es naheliegend den räumlichen Gradienten der (Ver)Drehwinkel θ_i (Rel. 3-2) zu bilden, welcher wiederum eine direkte mathematische Verbindung zum symmetrischen infinitesimalen Verzerrungstensor ε_{ij} (Rel. 2-14) herstellt:

$$\begin{aligned} \chi_{ij} &= \frac{\partial \theta_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} \cdot e_{ikl} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = \frac{1}{2} \cdot e_{ikl} \cdot \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = e_{ikl} \cdot \frac{\partial \varepsilon_{lj}}{\partial x_k} \\ \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_i} \right) = \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_j} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 3-3})$$

Die eingeführte Größe (Rel. 3-3) stellt die auf eine Bogenlänge bezogene Änderung der Rotationen θ_i , also den infinitesimalen Krümmungstensor χ_{ji} , dar. Da die Rotationen θ_i bereits erste räumliche Ableitungen des Verschiebungsfeldes beinhalten (Rel. 3-2), weist der Gradient der so dargestellten (Ver)Drehwinkel, also des infinitesimalen Krümmungstensors χ_{ji} , offensichtlich zweite räumliche Ableitungen des vektoriellen Deformationsfeldes auf. Diese können als ein Maß für (plastische) Verzerrungsgradienten angesehen werden, die den geometrisch notwendigen Versetzungen einleitend zugeordnet worden sind. Da es sich bei Versetzungsdichten um skalare Größen handelt, ist es naheliegend einen effektiven Verzerrungsgradienten bzw. eine effektive Krümmung zu definieren, um so die Verbindung zur geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g herzustellen. Hierfür wird analog zu (Rel. 3-1) die 2. Invariante des – bereits durch seine Struktur von sich aus deviatorischen (Beweis siehe (Rel. 3-5)) – infinitesimalen

Krümmungstensor χ_{ji} (Rel. 3-3) zur repräsentativen skalaren Quantifizierung der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g herangezogen (von Mises Krümmungsinvariante):

$$\chi_e := \sqrt{\frac{2}{3} \cdot \chi_{ij} \cdot \chi_{ij}} \quad (\text{Rel. 3-4})$$

Zudem sind die (Ver)Drehwinkel θ_i über den räumlichen Rotationsoperator $e_{ijk} \cdot \partial/\partial x_j$ des vektoriellen Verschiebungsfeldes u_i definiert, was als Konsequenz zur Folge hat, dass der infinitesimale Krümmungstensor χ_{ji} eine unsymmetrische deviatorische Größe darstellt, da im Allgemeinen die Divergenz ($\partial_i/\partial x_i$) der Rotation eines Vektorfeldes null ist:

$$\chi_{ii} = \frac{\partial \theta_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \cdot e_{ikl} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) = \frac{1}{2} \cdot e_{ikl} \cdot \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_k} = 0 = e_{ikl} \cdot \frac{\partial \varepsilon_{li}}{\partial x_k} \quad (\text{Rel. 3-5})$$

Anders ausgedrückt muss die Spur eines deviatorischen Tensors 2. Stufe stets verschwinden, was in (Rel. 3-5) am infinitesimalen Krümmungstensor χ_{ji} dargestellt ist. Damit ist gezeigt, dass der Deviator des infinitesimalen Krümmungstensors χ_{ji} durch diesen selbst ersetzt werden kann, da nach (Rel. 3-5) offensichtlich die Beziehung

$$\chi_{ij} = \chi'_{ij} = \chi_{ij} - \frac{1}{3} \cdot \chi_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 3-6})$$

gilt.

Damit sind die beiden Kategorien von Versetzungsdichten und deren Verknüpfungen zu tensoriellen kontinuumsmechanischen Feldgrößen ausreichend dargestellt und es kann auf die Zusammenführung der beiden Größen zu einer Gesamtversetzungsdichte ρ übergegangen werden. Ein wesentlicher Punkt ist durch die Verknüpfung \mathcal{E} des infinitesimalen Verzerrungstensors ε_{ij} (bzw. dessen Deviator ε'_{ij}) und des infinitesimalen Krümmungstensors χ_{ji} gegeben, da beide Größen jeweils der statistisch verteilten (ρ_s) und geometrisch notwendigen (ρ_g) Versetzungsdichte zugeordnet sind und diese Versetzungsdichten quantifizieren. Die Verknüpfungsfunktion $\mathcal{E} := \widehat{\mathcal{E}}$ beschreibt naheliegenderweise die gesamte Versetzungsdichte ρ des betrachteten Bereichs. Da in der Verknüpfungsfunktion $\widehat{\mathcal{E}}$ die dimensionslose Größe der Verzerrung ε_{ij} mit der längenbezogenen Größe der Krümmung χ_{ji} verbunden wird, ist es erforderlich und sinnvoll eine dem Material angepasste intrinsische Länge l einzuführen, welche die Krümmungen χ_{ji} in dimensionslose Größen überführen. Sie sind dann mit den dimensionslosen Verzerrungen ε_{ij} in elementarer Weise verknüpfbar und können so die gesamte Versetzungsdichte ρ quantifizierend beschreiben. Es wäre auch ein analoger Ansatz denkbar, bei dem die dimensionslosen Verzerrungen ε_{ij} auf eine intrinsischen Länge bezogen werden und die so erhaltenen Größen mit den längenbezogenen Krümmungen χ_{ji} auf einfache Weise zu verknüpfen, wobei die daraus resultierenden Werte offensichtlich wiederum die gesamte Verzerrungsdichte ρ quantifizierend beschreiben:

$$\mathcal{E} := \widehat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \chi_{ji}; l) \quad (\text{Rel. 3-7})$$

Damit sind die wesentlichen Gemeinsamkeiten der in diesem Abschnitt vorgestellten Gradientenmodelle angeführt. Die hauptsächlichen Unterschiede in den Modellen sind durch folgende Eigenschaften charakterisiert:

- I. Die Art der Verknüpfungsfunktion von $\mathcal{E} := \widehat{\mathcal{E}}$ kann einerseits mehr makroskopisch phänomenologisch oder aber andererseits rein mikromechanisch, aus Modellen des Kristallsystems (bspw. Ansätze zu Beschreibung von Versetzungsbewegung durch Taylormodell, Peach-Köhler-Kraft, etc. siehe Abschnitt 2.2), motiviert sein.
- II. Die Verwendung der Erhaltungsgleichungen hinsichtlich Impuls- und Drehimpulsbilanz stellt ein weiteres Unterscheidungsmerkmal dar.
- III. Die Notwendigkeit eines mehrskaligen Modellansatzes ist bei mikromechanisch motivierten Gradientenmodellen ebenfalls ein Unterscheidungsmerkmal, da bei phänomenologischen Ansätzen diese Technik nicht verwendet werden muss.

Abschließend bleibt noch zu erwähnen, dass auf die ersten fundamentalen Arbeiten zu gradientenbasierten Theorien von (Koiter, 1960), (Koiter, 1964), (Toupin, 1962), (Mindlin, 1963) nicht näher eingegangen wird, da diese sich nur auf rein elastisches Materialverhalten beziehen und zudem den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden. Stattdessen werden aus der Vielzahl von Gradiententheorien der Plasti-

zität nur die 3 wichtigsten Modelle vorgestellt, wobei diese Beschreibungen aber die Ansätze enthalten, die in verschiedensten Formen in der großen Anzahl anderer Modelle immer wieder vorzufinden sind.

3.1 Couple-Stress Theory

Die sogenannte „Couple-Stress Theory“ stellt im Gegensatz zur klassischen Beschreibung zwar eine formal konsequente jedoch naheliegende Erweiterung dar. Bei dieser Verallgemeinerung wird jedem gerichteten Oberflächenelement mit der infinitesimalen Fläche dS zu der üblicherweise vorhandenen Kraft- K_j bzw. dessen zugeordnetem Spannungsvektor T_j

$$K_j := T_j \cdot dS \quad (\text{Rel. 3-8})$$

ein Moment- M_j mit assoziiertem Momentenspannungsvektor q_j

$$M_j := q_j \cdot dS \quad (\text{Rel. 3-9})$$

zugewiesen. Führt man den zu jedem Oberflächenelement zugeordneten Einheitsnormalvektor n_i ein, so kann gezeigt werden, dass der dem Spannungsvektor T_j zugeordnete Spannungstensor π_{ij} nicht mehr symmetrisch sein kann, weshalb man diese Größe π_{ij}

$$\begin{aligned} \pi_{ij} &= \sigma_{ij} + \tau_{ij} \quad \text{mit} \\ \sigma_{ij} &:= \frac{1}{2} \cdot (\pi_{ij} + \pi_{ji}) \\ \tau_{ij} &:= \frac{1}{2} \cdot (\pi_{ij} - \pi_{ji}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 3-10})$$

in einen symmetrischen Anteil σ_{ij} sowie antisymmetrischen Anteil τ_{ij} aufspaltet. Die Größe σ_{ij} stellt hierin den in der klassischen Theorie bekannten Cauchyschen Spannungstensor dar:

$$T_j := \pi_{ij} \cdot n_i = (\sigma_{ij} + \tau_{ij}) \cdot n_i \quad (\text{Rel. 3-11})$$

In formal analoger Weise kann der Momentenspannungstensor μ_{ij} bezüglich des Momentenspannungsvektors q_j eingeführt werden:

$$q_j := \mu_{ij} \cdot n_i \quad (\text{Rel. 3-12})$$

Die englische Bezeichnung für den Momentenspannungstensor μ_{ij} lautet „couple stress tensor“ und gibt dieser verallgemeinerten Theorie auch den Namen. In ähnlicher Weise kann die Größe μ_{ij} in einen hydrostatischen $\tilde{\mu}_{ij}$ und deviatorischen $m_{ij} := \mu'_{ij}$ Anteil wie folgt additiv zerlegt werden:

$$\tilde{\mu}_{ij} := \frac{1}{3} \cdot \mu_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad \text{sowie} \quad m_{ij} := \mu'_{ij} := \mu_{ij} - \frac{1}{3} \cdot \mu_{kk} \cdot \delta_{ij} = \mu_{ij} - \tilde{\mu}_{ij} \quad (\text{Rel. 3-13})$$

Es kann gezeigt werden, dass der hydrostatische Anteil $\tilde{\mu}_{ij}$ des Momentenspannungstensor μ_{ij} keinen Einfluss auf die Feld- bzw. Erhaltungsgleichungen, wie bspw. der Impuls- oder Drallbilanz, hat (Koiter, 1964). Deshalb kann zweckmäßigerweise der Momentenspannungstensor μ_{ij} durch seinen deviatorischen Anteil $m_{ij} := \mu'_{ij}$ ersetzt werden.

$$\mu'_{ij} \equiv \mu_{ij} \equiv m_{ij} \quad (\text{Rel. 3-14})$$

Somit kann das Kräftegleichgewicht in Form der Impulserhaltung

$$\frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_j} = 0_i \quad (\text{Rel. 3-15})$$

sowie das Momentengleichgewicht in Form der Drallerhaltung

$$\tau_{jk} = -\frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{\partial m_{pi}}{\partial x_p} \quad (\text{Rel. 3-16})$$

formuliert werden, wobei die Volumenkräfte sowie die in dieser Theorie neu hinzukommenden Volumenmomente hier nicht berücksichtigt sind. Aus (Rel. 3-16) ist ersichtlich, dass für einen bekannten antisymmetrischen Anteil τ_{jk} des Spannungstensors π_{ij} die Verteilung des deviatorischen Anteils des Momentenspannungstensors $m_{ij} := \mu'_{ij}$ und aufgrund von (Rel. 3-14) der „couple stress tensor“ μ_{ij} bekannt ist.

Für die Formulierung des Prinzips der virtuellen Verschiebungen sind noch die konjugierten Größen zum Momentenspannungstensor μ_{ij} einzuführen. Da Momente eng mit rotierenden Bewegungen verknüpft sind, ist es nachvollziehbar die Momente mit den aus dem Verschiebungsfeld resultierenden (Ver-)Drehwinkeln aus (Rel. 3-2) definierend in Verbindung zu bringen.

Für die einleitend erwähnten Beschränkungen auf kleine Deformationen kann die Winkelgeschwindigkeit durch elementare Zeitableitung der Verdrehungen ermittelt werden.

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \dot{\theta}_i = \frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{d}{dt} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{du_k}{dt} = \frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{\partial \dot{u}_k}{\partial x_j} \quad (\text{Rel. 3-17})$$

Daraus kann die Bilanz der Spannungsleistung \dot{U} eines beliebigen Volumenelements dV formuliert werden. Die während eines Zeitinkrements an einem beliebigen Volumen V verrichtete Arbeit entspricht der Leistung, welche durch die äußeren Kraft- und Momentenspannungen an der Oberfläche $S \equiv \partial V$ verrichtet wird (Bilanz der Spannungsleistung):

$$\int_V \dot{U} dV = \int_{\partial V} (T_i \cdot \dot{u}_i + q_i \cdot \dot{\theta}_i) dS = \int_S (T_i \cdot \dot{u}_i + q_i \cdot \dot{\theta}_i) dS \quad (\text{Rel. 3-18})$$

Mit dem Gaußschen Integralsatz (bzw. Divergenztheorem) lässt sich obige Beziehung (Rel. 3-18) in folgende Form umwandeln

$$\int_V \dot{U} dV = \int_S (T_i \cdot \dot{u}_i + q_i \cdot \dot{\theta}_i) dS = \int_V (\sigma_{ij} \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + m_{ij} \cdot \dot{\chi}_{ji}) dV \quad (\text{Rel. 3-19})$$

worin der infinitesimale symmetrische Verzerrungstensor ε_{ij} die konjugierte Größe zum symmetrischen Cauchyschen Spannungstensor σ_{ij} ist. In analoger Weise stellt der infinitesimale Krümmungstensor χ_{ij} die konjugierte Größe zum Momentenspannungstensor m_{ij} dar.

Aus (Rel. 3-3) und (Rel. 2-14) ist ersichtlich, dass die (infinitesimale) Krümmung χ_{ji} über das vektorielle Verschiebungsfeld u_i verknüpft ist, wodurch zum (infinitesimalen) Verzerrungstensor ε_{ij} ein Zusammenhang besteht.

Streng genommen ist die Bilanzgleichung (Rel. 3-18) bzw. (Rel. 3-19) nur für inkompressible Materialien gültig. Das ist für metallische bzw. plastisch deformierte Materialien auch weitestgehend erfüllt ist, da bei Volumenerhaltung die Äquivalenz

$$\sigma_{ij} \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} = s_{ij} \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} \quad (\text{Rel. 3-20})$$

gilt, wobei die Größe s_{ij} den deviatorischen Anteil

$$\tilde{s}_{ij} := \frac{1}{3} \cdot \sigma_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad \text{sowie} \quad s_{ij} := \sigma'_{ij} := \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \cdot \sigma_{kk} \cdot \delta_{ij} = \sigma_{ij} - \tilde{s}_{ij} \quad (\text{Rel. 3-21})$$

des Cauchyschen Spannungstensors σ_{ij} repräsentiert. Für kompressible Werkstoffe ist der Cauchysche Spannungstensor σ_{ij} durch seinen Deviator s_{ij} in (Rel. 3-18) bzw. (Rel. 3-19) zu ersetzen, wobei der Momentenspannungstensor μ_{ij} bereits in (Rel. 3-16) durch seinen deviatorischen Anteil $\mu'_{ij} \equiv m_{ij}$ substituiert werden konnte. Daraus resultierend, kann die Erhaltungsgleichung (Rel. 3-19) für kompressible Materialien wie folgt

$$\int_V \dot{U} dV = \int_S (T_i \cdot \dot{u}_i + q_i \cdot \dot{\theta}_i) dS = \int_V (s_{ij} \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + m_{ij} \cdot \dot{\chi}_{ji}) dV \quad (\text{Rel. 3-22})$$

umgeschrieben werden.

Damit sind im Wesentlichen die Kinematik und Bilanzgleichungen für die „Couple-Stress Theory“ dargestellt und es können die eigentlich charakterisierenden Ansätze bezüglich der Versetzungsdichte(n) zu diesem Modell beschrieben werden.

Ein wesentlicher Ansatzpunkt in dieser Theorie ist durch die spezielle Form der Verknüpfungsfunktion $\hat{\mathcal{E}}$ (Rel. 3-7) gegeben, welche die phänomenologisch kinematischen Größen zur Quantifizierung der gesamten Versetzungsdichte ρ verwendet (siehe Einleitung in diesem Abschnitt):

$$\mathcal{E} := \hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \chi_{ji}; l) := \sqrt{\varepsilon_e^2 + l^2 \cdot \chi_e^2} \quad \mathcal{E}^2 = \frac{2}{3} \cdot \varepsilon'_{ij} \cdot \varepsilon'_{ij} + l^2 \cdot \frac{2}{3} \cdot \chi_{ij} \cdot \chi_{ij} \quad (\text{Rel. 3-23})$$

Aus (Rel. 3-23) ist ersichtlich, dass die effektive Krümmung ($\triangleq \rho_g$) mit der charakteristischen intrinsischen Länge l multiplikativ verknüpft ist, um eine zum effektiven Verzerrungstensor ($\triangleq \rho_s$) konsistente Größe zu generieren, wodurch dann eine additive Verknüpfung beider Felder möglich ist. Dies entspricht im Wesentlichen der Tatsache, dass die gesamte Versetzungsanzahl gleich der Summe aus den statisch verteilten und geometrisch notwendigen Versetzungen ist. Unter der charakteristischen intrinsischen Länge l kann man sich die im Mittel frei zur Verfügung stehende Weglänge vorstellen, die eine Versetzung für ihre Bewegung in Bezug zu seinen Nachbarn hat. Damit kann diese Größe l auch als mittlerer Abstand von statistisch verteilten Versetzungen untereinander interpretiert werden. Außerdem sei noch darauf verwiesen, dass die Verknüpfungsfunktion $\mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ zwar die gesamte Versetzungsdichte $\rho \triangleq \mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ quantifiziert, gleichzeitig aber auch als effektive Gesamtverzerrung interpretiert werden kann, die sich aus dem Verschiebungsfeld resultierenden translatorischen und rotatorischen Verzerrungen zusammensetzt.

Einen weiteren zentralen Ansatzpunkt dieser Theorie stellt die Annahme der Existenz einer freien Energiedichtefunktion $\mathcal{w} := \hat{\mathcal{w}}$ in Abhängigkeit der effektiven Gesamtverzerrung $\mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ dar,

$$\mathcal{w} := \hat{\mathcal{w}} \left(\hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \chi_{ji}; l) \right) = \hat{\mathcal{w}}(\mathcal{E}) \quad (\text{Rel. 3-24})$$

wobei in alternativer Betrachtungsweise die Abhängigkeit dieser freien Energiedichtefunktion auch von der gesamten Versetzungsdichte $\rho \triangleq \mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ interpretierbar ist. An dieser Stelle sei explizit darauf hingewiesen, dass dieser Ansatz für die Energiedichtefunktion rein phänomenologischer Natur ist, und in der Kontinuumsmechanik ein bewährtes und übliches Vorgehen darstellt. Keiner der in dieser Theorie verwendeten Ansätze resultiert streng genommen aus einem mikrostrukturell motivierten Modell, weshalb diese Theorie als eine rein phänomenologische Beschreibung angesehen werden muss, obwohl naheliegende Verbindungen zwischen infinitesimalen Verzerrungen bzw. Krümmung in Bezug zu den vorliegenden Kategorien von Versetzungsdichten vorhanden sind.

Die virtuelle Arbeit $\delta \mathcal{w}$ kann aus den kompatiblen virtuellen Deformationen δu_i bzw. den direkt verknüpften virtuellen (Ver)drehwinkeln $\delta \theta_i$

$$\delta \theta_i := \frac{1}{2} \cdot e_{ijk} \cdot \frac{\partial \delta u_k}{\partial x_j} \quad (\text{Rel. 3-25})$$

und den daraus resultierenden virtuellen infinitesimalen Verzerrungsmaßen $\delta \varepsilon_{ij}$ bzw. Krümmungen $\delta \chi_{ij}$

$$\begin{aligned} \delta \varepsilon_{ij} &:= \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta u_j}{\partial x_i} \right) \\ \delta \chi_{ji} &:= \frac{\partial \delta \theta_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \cdot e_{ikl} \cdot \frac{\partial^2 \delta u_l}{\partial x_j \partial x_k} = e_{ikl} \cdot \frac{\partial \delta \varepsilon_{jl}}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 3-26})$$

zusammen mit den zugeordneten konjugierten deviatorischen Kraft- s_{ij} bzw. Momentenspannungsgrößen m_{ij} wie folgt ausgedrückt werden:

$$\delta \mathcal{w} = s_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + m_{ij} \cdot \delta \chi_{ji} \quad (\text{Rel. 3-27})$$

Diese Bilanzgleichung (Rel. 3-27) ist auch über die 1. Variation der Energiedichtefunktion $\mathcal{w} := \hat{\mathcal{w}}$ bezüglich der zu den Spannungen s_{ij} bzw. m_{ij} konjugierten infinitesimalen Verzerrungsgrößen ε_{ij} bzw. χ_{ij} herleitbar, wobei der in (Rel. 3-23) und (Rel. 3-24) angegebene Parameter l als eine Materialkonstante zu interpretieren ist. Zudem sei an dieser Stelle noch darauf verwiesen, dass der infinitesimale Krümmungstensor χ_{ji} ebenfalls explizit von dem infinitesimalen Verzerrungstensor ε_{ij} abhängt, weshalb bei der analytischen Berechnung der 1. Variation der Energiedichtefunktion $\mathcal{w} := \hat{\mathcal{w}}$ einzig der infinitesimale Verzerrungstensor ε_{ij} als unabhängige funktionale Variable anzusehen bzw. zu variieren ist:

$$\begin{aligned} \delta \hat{\mathcal{w}} \left(\hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \chi_{ji}; l) \right) &:= \frac{\partial \mathcal{w}}{\partial \mathcal{E}} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \chi_{ji}} \cdot \frac{\partial \chi_{ji}}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} \right) \\ \delta \mathcal{w} &= \frac{\partial \mathcal{w}}{\partial \mathcal{E}} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \frac{\partial \mathcal{w}}{\partial \mathcal{E}} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \chi_{ji}} \cdot \delta \chi_{ji} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 3-28})$$

Durch einen Vergleich der Koeffizienten von (Rel. 3-27) mit (Rel. 3-28) bezüglich der Variationen der konjugierten infinitesimalen kinematischen Größen $\delta\varepsilon_{ij}$ bzw. $\delta\chi_{ij}$ können die Bestimmungsgleichungen des Kraft- und Momentenspannungstensors s_{ij} bzw. m_{ij} ermittelt werden.

$$s_{ij} := \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad m_{ij} := \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \chi_{ji}} \quad (\text{Rel. 3-29})$$

In diesem Zusammenhang ist es zweckmäßig bezüglich der effektiven Gesamtverzerrung $\varepsilon = \widehat{\varepsilon}$, die auch als gesamte Versetzungsdichte $\rho \triangleq \varepsilon = \widehat{\varepsilon}$ interpretierbar ist, eine konjugierte Spannungsgröße Σ zu definieren, deren Bestimmungsgleichung

$$\Sigma := \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} \quad (\text{Rel. 3-30})$$

bereits in (Rel. 3-29) enthalten ist. Diese konjugierte Spannungsgröße Σ kann als eine Art Fließspannung interpretiert werden, da diese unmittelbar mit der konjugierten effektiven Gesamtverzerrung $\varepsilon = \widehat{\varepsilon}$ in Zusammenhang steht, wobei diese Größe wiederum als gesamte Versetzungsdichte $\rho \triangleq \varepsilon = \widehat{\varepsilon}$ interpretierbar ist. D. h., dass mindestens die durch (Rel. 3-30) definierte Fließspannung Σ aufgebracht werden muss, um ein Kollektiv von Versetzungen, welche durch die Größe $\rho \triangleq \varepsilon = \widehat{\varepsilon}$ determiniert ist, im betrachteten Volumen zu bewegen.

Unter Verwendung von (Rel. 3-1) und (Rel. 3-4) können die in (Rel. 3-29) determinierten Kraft- und Momentenspannungstensoren durch Substitution analytisch berechnet werden:

$$s_{ij} := \frac{2}{3} \cdot \frac{\Sigma}{\varepsilon} \cdot \varepsilon_{ij} \quad m_{ij} := \frac{2}{3} \cdot l^2 \cdot \frac{\Sigma}{\varepsilon} \cdot \chi_{ji} \quad (\text{Rel. 3-31})$$

Motiviert aus der Definition der 2. Invarianten des deviatorischen Kraft- (s_{ij}) und Momentenspannungstensors (m_{ij}) können die zugehörigen skalaren effektiven „von Mises“-Vergleichsspannungen

$$\sigma_e := \sqrt{\frac{2}{3} \cdot s_{ij} \cdot s_{ij}} \quad m_e := \sqrt{\frac{2}{3} \cdot m_{ij} \cdot m_{ij}} \quad (\text{Rel. 3-32})$$

eingeführt werden. Dadurch ist es wiederum mit Hilfe der Definitionsgleichungen für die effektive Gesamtverzerrung (Rel. 3-23) sowie den Kraft- (s_{ij}) und Momentenspannungstensor (m_{ij}) (Rel. 3-29) möglich, die Fließspannung Σ (Rel. 3-30) als Funktion der eben eingeführten effektiven Spannungsgrößen (Rel. 3-32) auszudrücken:

$$\Sigma^2 = \sigma_e^2 + l^{-2} \cdot m_e^2 \quad (\text{Rel. 3-33})$$

Damit sind die wesentlichen Aspekte dieser Theorie beschrieben, wobei nochmals darauf verwiesen werden soll, dass hier nur 2. Invarianten der infinitesimalen Verzerrungsgrößen und deren Gradienten in Form der Krümmung sowie die dazu konjugierten Kraft- und Momentenspannungen im Rahmen isotroper Verfestigung verwendet wurden.

3.2 Strain Gradient Plasticity

Die „Strain Gradient Plasticity“ Theorie stellt in Bezug auf die im letzten Abschnitt 3.1 vorgestellte „Couple-Stress Theory“ insofern eine Verallgemeinerung dar, als diese nicht nur die 2. Invariante, sondern alle quadratischen Invarianten des Verzerrungsgradienten η_{ijk} ,

$$\eta_{ijk} := \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k \partial x_j} + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_k \partial x_i} \right) = \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_j} = \eta_{jik} \quad (\text{Rel. 3-34})$$

welche die Krümmungen quantifizieren, berücksichtigt. Ein weiterer Unterschied zur „Couple-Stress Theory“ folgt aus der direkten Verwendung des Verzerrungsgradiententensors 3. Stufe η_{ijk} , anstatt des infinitesimalen Krümmungstensors 2. Stufe χ_{ij} . Letztgenannter enthält den Verzerrungsgradienten zwar auch, stellt jedoch wegen der doppelten Indexverknüpfung mit dem antisymmetrischen Epsilon-Tensor e_{ijk} (Permutationssymbol bzw. Levi-Civita-Symbol) eine tensorielle Größe der Stufe 2 dar. Aus diesem Grund muss dem Verzerrungsgradiententensor η_{ijk} eine konjugierte Spannungsgröße 3. Stufe (Spannungstensor höherer Ordnung) τ_{ijk} zugeordnet werden, um das Prinzip der virtuellen Arbeit δw (Rel. 3-36) für beliebige aber kompatible virtuelle Verschiebungen δu_i

$$\delta \varepsilon_{ij} := \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \delta u_j}{\partial x_i} \right) \quad \delta \eta_{ijk} := \frac{\partial \delta u_k}{\partial x_j \partial x_i} = \frac{\partial \delta \varepsilon_{ij}}{\partial x_k} \quad (\text{Rel. 3-35})$$

formulieren zu können:

$$\delta \mathcal{W} = \sigma_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} \quad (\text{Rel. 3-36})$$

Spannungstensoren höherer Ordnung wurden bereits in den 60er Jahren des vorigen Jahrhunderts im Rahmen einer verallgemeinerten Elastizitätstheorie von (Toupin, 1962), (Mindlin, 1963), (Mindlin, 1964), (Mindlin, 1965) eingeführt, wobei in diesem Zusammenhang auch ein allgemeines Konzept zur Darstellung und Behandlung dieser Größen entwickelt wurde. Auf eine vollständige Herleitung bezüglich der notwendigen Einführung von Spannungstensoren höherer Ordnung (τ_{ijk}) soll hier verzichtet werden, und nur auf die entsprechenden Fundamentalarbeiten der genannten Autoren verwiesen werden.

Analog zum vorigen Abschnitt 3.1 wird eine spezielle Form der Verknüpfungsfunktion $\widehat{\mathcal{E}}$ (Rel. 3-7) bzw. (Rel. 3-33) eingeführt, welche die kinematischen Größen zur Quantifizierung der gesamten Versetzungsdichte ρ verwendet (siehe auch die Einleitung zu diesem Kapitel):

$$\mathcal{E} := \widehat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l) := \sqrt{\varepsilon_e^2 + l^2 \cdot \eta_e^2} \quad (\text{Rel. 3-37})$$

In (Rel. 3-37) gelten die analogen Interpretationen bezüglich der Zuordnung der statistisch verteilten bzw. geometrisch notwendigen Versetzungsdichten in Relation zu den skalaren bzw. effektiven Deformationsgrößen ε_e und η_e , wobei in der „Strain Gradient Plasticity Theory“ der effektive Verzerrungsgradient η_e die Rolle der effektiven infinitesimalen Krümmung aus der „Couple-Stress Theory“ übernimmt. Ebenso kann wie in Abschnitt 3.1 die spezielle Form der Verknüpfungsfunktion (Rel. 3-37) auch hier als eine effektive Gesamtverzerrung $\mathcal{E} = \widehat{\mathcal{E}}$ angesehen werden, was für die Einführung eines Potentials in Form der Energiedichtefunktion $\mathcal{W} := \widehat{\mathcal{W}}$ wesentlich ist.

Um detailliertere Aussagen zur Darstellung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e zu geben, müssen einige elementare Zerlegungen zum Verzerrungsgradiententensor 3. Stufe η_{ijk} eingeführt werden.

Der symmetrische und antisymmetrische Anteil von η_{ijk} kann aufgrund der Eigenschaften rotierender Indexpermutationen in Analogie zu Tensoren 2. Stufe durch

$$\eta_{ijk}^S := \frac{1}{3} \cdot (\eta_{ijk} + \eta_{jki} + \eta_{kij}) \quad \eta_{ijk}^A := \eta_{ijk} - \eta_{ijk}^S \quad (\text{Rel. 3-38})$$

definiert werden, wobei für den symmetrischen Anteil analogerweise $\eta_{ijk}^S = \eta_{jki}^S = \eta_{kij}^S$ gilt. Des Weiteren kann der Verzerrungsgradiententensor 3. Stufe η_{ijk} in Analogie zu den Definitionen von Tensoren 2. Stufe in einen hydrostatischen sowie deviatorischen Anteil

$$\tilde{\eta}_{ijk} := \frac{1}{4} \cdot (\delta_{ik} \cdot \eta_{jpp} + \delta_{jk} \cdot \eta_{ipp}) \quad \eta'_{ijk} := \eta_{ijk} - \tilde{\eta}_{ijk} \quad (\text{Rel. 3-39})$$

additiv zerlegt werden, wobei für den hydrostatischen Anteil $\tilde{\eta}_{ijk} = \tilde{\eta}_{jik}$ und $\tilde{\eta}_{ijj} = \eta_{ijj}$ gilt. Außerdem ist der Deviator des Verzerrungsgradiententensor η_{ijk} orthogonal zu seinem hydrostatischen Anteil, was durch

$$\eta'_{ijk} \cdot \tilde{\eta}_{ijk} = 0 = \left(\eta_{ijk} - \frac{1}{4} \cdot \delta_{ik} \cdot \eta_{jpp} - \frac{1}{4} \cdot \delta_{jk} \cdot \eta_{ipp} \right) \cdot \frac{1}{4} \cdot (\delta_{ik} \cdot \eta_{jpp} + \delta_{jk} \cdot \eta_{ipp}) \quad (\text{Rel. 3-40})$$

formulierbar ist und als eine zentrale Eigenschaft angesehen werden kann, sowie den eigentlichen Grund für diese additive Zerlegung darstellt. Als weitere wichtige Zerlegung des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk} in Bezug zur Definition des effektiven Verzerrungsgradienten η_e ist eine additive Darstellung

$$\eta'_{ijk} = \sum_{i=1}^3 \eta_{ijk}^{(i)'} = \eta_{ijk}^{(1)'} + \eta_{ijk}^{(2)'} + \eta_{ijk}^{(3)'} \quad (\text{Rel. 3-41})$$

des deviatorischen Anteils von η_{ijk} (also η'_{ijk}) durch 3 unterschiedliche deviatorische Summanden $\eta_{ijk}^{(i)'} (1 \leq i \leq 3)$ die zudem paarweise aufeinander orthogonal sind:

$$\eta_{ijk}^{(i)'} \cdot \eta_{ijk}^{(j)'} = 0 \quad \forall \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \wedge i \neq j \quad (\text{Rel. 3-42})$$

Die explizite Darstellung dieser 3 Anteile wurde von (Smyshlyaev & Fleck, 1996) vorgeschlagen bzw. hergeleitet

$$\begin{aligned}\eta_{ijk}^{(1)'} &= \eta_{ijk}'^S - \frac{1}{5} \cdot (\delta_{ij} \cdot \eta_{kpp}'^S + \delta_{jk} \cdot \eta_{ipp}'^S + \delta_{ki} \cdot \eta_{jpp}'^S) \\ \eta_{ijk}^{(2)'} &= \frac{1}{6} \cdot (e_{ikp} \cdot e_{jlm} \cdot \eta_{lpm}' + e_{jkp} \cdot e_{ilm} \cdot \eta_{lpm}' + 2 \cdot \eta_{ijk}' - \eta_{jki}' - \eta_{kij}') \\ \eta_{ijk}^{(3)'} &= \frac{1}{6} \cdot (-e_{ikp} \cdot e_{jlm} \cdot \eta_{lpm}' - e_{jkp} \cdot e_{ilm} \cdot \eta_{lpm}' + 2 \cdot \eta_{ijk}' - \eta_{jki}' - \eta_{kij}') + \\ &\quad + \frac{1}{5} \cdot (\delta_{ij} \cdot \eta_{kpp}'^S + \delta_{jk} \cdot \eta_{ipp}'^S + \delta_{ki} \cdot \eta_{jpp}'^S)\end{aligned}\tag{Rel. 3-43}$$

und hat sich für die weitere Entwicklung der „Strain Gradient Plasticity Theory“ als sehr zweckmäßig erwiesen. Mit diesen Definitionen kann der effektive Verzerrungsgradient η_e unter Bezug auf (Rel. 3-37) eingeführt werden, für welchen üblicherweise zwei äquivalente Darstellungsformen Verwendung finden. Die ursprünglich eingeführte Formulierung verwendet nur den Deviator des Verzerrungsgradiententensors und kann wie folgt angeschrieben werden:

$$l^2 \cdot \eta_e^2 = c_1 \cdot \eta_{iik}' \cdot \eta_{jjk}' + c_2 \cdot \eta_{ijk}' \cdot \eta_{ijk}' + c_3 \cdot \eta_{ijk}' \cdot \eta_{kji}'\tag{Rel. 3-44}$$

Die zweite Formulierung greift auf die additive Zerlegung des Deviator des Verzerrungsgradiententensors (Rel. 3-41) sowie (Rel. 3-43) zurück:

$$l^2 \cdot \eta_e^2 = l_1^2 \cdot \eta_{ijk}^{(1)'} \cdot \eta_{ijk}^{(1)'} + l_2^2 \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} + l_3^2 \cdot \eta_{ijk}^{(3)'} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'}\tag{Rel. 3-45}$$

Sie ist für die meisten Anwendungsfälle die zweckmäßigere Darstellung, wobei die beiden Formen ineinander überführbar sind:

$$l_1^2 = c_2 + c_3 \quad l_2^2 = c_2 - \frac{1}{2} \cdot c_3 \quad l_3^2 = \frac{5}{2} \cdot c_1 + c_3 - \frac{1}{4} \cdot c_3\tag{Rel. 3-46}$$

Um eine Verbindung zur „Couple-Stress Theory“ herzustellen, müssen noch die quadratischen Invarianten des deviatorischen infinitesimalen Krümmungstensors χ'_{ij} durch den Deviator des Verzerrungsgradiententensors η'_{ijk} ausgedrückt werden. Dafür eignet sich ebenfalls wieder die in (Rel. 3-41) sowie (Rel. 3-43) eingeführte additive Zerlegung des deviatorischen Verzerrungsgradiententensors. An dieser Stelle sei noch darauf verwiesen, dass der Deviator des infinitesimalen Krümmungstensors χ'_{ij} identisch mit dem infinitesimalen Krümmungstensor χ_{ij} ist, was durch (Rel. 3-5) bzw. (Rel. 3-6) gezeigt wurde. Außerdem ist in der „Couple-Stress Theory“ nur eine einzige quadratische Invariante der Form $\chi'_{ij} \cdot \chi'_{ij}$ verwendet worden um die effektive Krümmung χ_e durch (Rel. 3-4) zu bestimmen (von Mises Krümmungsinvariante). Die Überführung der Invarianten des deviatorischen Verzerrungsgradiententensors in die des infinitesimalen Krümmungstensors kann nun wie folgt angegeben werden

$$\begin{aligned}\chi'_{ij} \cdot \chi'_{ij} &= \frac{3}{8} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} + \frac{5}{16} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'} \\ \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ji} &= \frac{3}{8} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} + \frac{5}{16} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'}\end{aligned}\tag{Rel. 3-47}$$

wobei die Invertierung dieser linearen Beziehung (Rel. 3-47) durch

$$\begin{aligned}\eta_{ijk}^{(2)'} \cdot \eta_{ijk}^{(2)'} &= \frac{4}{3} \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ij} + \frac{4}{3} \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ji} \\ \eta_{ijk}^{(3)'} \cdot \eta_{ijk}^{(3)'} &= \frac{8}{5} \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ij} - \frac{8}{5} \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ji}\end{aligned}\tag{Rel. 3-48}$$

gegeben ist. Damit kann der effektive Verzerrungsgradient η_e (Rel. 3-45) durch die Beziehung

$$l^2 \cdot \eta_e^2 = l_1^2 \cdot \eta_{ijk}^{(1)'} \cdot \eta_{ijk}^{(1)'} + \left(\frac{4}{3} \cdot l_2^2 + \frac{8}{5} \cdot l_3^2\right) \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ij} + \left(\frac{4}{3} \cdot l_2^2 - \frac{8}{5} \cdot l_3^2\right) \cdot \chi'_{ij} \cdot \chi'_{ji}\tag{Rel. 3-49}$$

ausgedrückt werden, welche nun auch den infinitesimalen Krümmungstensor $\chi_{ij} = \chi'_{ij}$ enthält, wodurch eine Verbindung zur „Couple-Stress Theory“ gegeben ist. Um die reformulierte Beziehung (Rel.

3-49) des effektiven Verzerrungsgradienten η_e , der die geometrisch notwendige Versetzungsdichte ρ_g repräsentiert, in die Bestimmungsgleichung (Rel. 3-23) der „Couple-Stress Theory“ überzuführen, müssen die konstanten Vorfaktoren, welche intrinsische Längen l_i enthalten, entsprechend determiniert bzw. durch die intrinsische Länge l parametrisiert werden. Resultierend aus dem eben beschriebenen Vorgehen kann die generalisierte Bestimmungsgleichung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e (Rel. 3-49) der „Strain Gradient Theory“ durch folgende, mittels l parametrisierten Koeffizientenwahl

$$l_1 = 0 \quad l_2 = \frac{1}{2} \cdot l \quad l_3 = \sqrt{\frac{5}{24}} \cdot l \quad (\text{Rel. 3-50})$$

in die Darstellung (Rel. 3-23) der „Couple-Stress Theory“ übergeführt werden. Wie aus (Rel. 3-23) und (Rel. 3-49) zusammen mit (Rel. 3-50) ersichtlich ist, werden im Rahmen der „Couple-Stress Theory“ nur die durch den Verzerrungsgradienten hervorgerufene Rotationen, nicht aber die aus ihm resultierenden Längenänderungen, die den Dehnungen entsprechen, berücksichtigt. An diesem Punkt setzt die verallgemeinerte „Strain Gradient Theory“ an, da diese mehrere Invarianten des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk} in seiner effektiven Größe η_e beinhaltet und dadurch sowohl verdrehungsbezogene als auch längenänderungsbezogene Deformationszustände abbilden kann. Ein zentraler Unterschied in der „Strain Gradient Theory“ zur „Couple-Stress Theory“ ist somit in der Wahl der Koeffizienten zur Ermittlung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e gegeben, der gleichzeitig zur quantitativen Repräsentation der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g dient, wobei die Koeffizienten durch an Versuche angepasste Modellrechnungen zu ermitteln sind. Die wesentlichen Belastungstests zur Anpassung dieses Modellansatzes sind Experimente durch Mikro- oder Nanoindentation (Nix, 1997) (Ma & Clarke, 1995), Biegung (Stolken & Evans, 1998) und Torsion (Fleck, Muller, Ashby, & Hutchinson, 1994). In den unterschiedlichen Varianten der „Strain Gradient Theory“ sind die folgenden, durch die charakteristische intrinsische Länge l parametrisierten Koeffizienten

$$l_1 = l \quad l_2 = \frac{1}{2} \cdot l \quad l_3 = \sqrt{\frac{5}{24}} \cdot l \quad (\text{Rel. 3-51})$$

von den Autoren des Gradientenplastizitätsmodells vorgeschlagen worden, wobei je nach Belastungsart für den 1. Koeffizienten auch $l_1 = 1/8 \cdot l$ empfohlen wird (Begley & Hutchinson, 1998).

Analog zur „Couple-Stress Theory“ wird auch im Rahmen der „Strain Gradient Theory“ eine Energiedichte $w := \hat{w} := \tilde{w}$ als Funktion der effektive Gesamtverzerrung $\mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ (Rel. 3-37) eingeführt (Verknüpfungsfunktion),

$$w := \hat{w}(\mathcal{E}) = \hat{w}(\hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l)) =: \tilde{w}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l) = w \quad (\text{Rel. 3-52})$$

um damit die Spannungstensoren σ_{ij} (höherer Ordnung τ_{ijk}) durch entsprechende partielle Ableitungen nach den kinematischen Verzerrungsgrößen ε_{ij} und η_{ijk} bestimmen zu können. In (Rel. 3-52) ist die intrinsische Länge wiederum als konstanter Materiaparameter anzusehen. Führt man an dieser Energiedichtefunktion (Rel. 3-52) die erste Variation bezüglich des Verschiebungsvektors u_i , der als alleinige unabhängige Größe angesehen werden kann, durch, so folgt der Ausdruck

$$\delta w := \delta \hat{w}(\hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l)) = \frac{\partial w}{\partial \mathcal{E}} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \eta_{ijk}} \cdot \delta \eta_{ijk} \right) \quad (\text{Rel. 3-53})$$

Dabei wurde hier für die partielle Ableitung der freien Energiedichtefunktion $w := \hat{w}$ nach der effektive Gesamtverzerrung $\mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ (Term $\partial w / \partial \mathcal{E}$) aus rechentechnischen Gründen keine konjugierte skalare Spannung Σ eingeführt, wie dies im Abschnitt 3.1 zur „Couple-Stress Theory“ noch erfolgte. Daraus folgernd kann die 1. Variation durch den Ausdruck

$$\delta w = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk})}{\partial \mathcal{E}} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk})}{\partial \mathcal{E}} \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \eta_{ijk}} \cdot \delta \eta_{ijk} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{ij}} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \frac{\partial w}{\partial \eta_{ijk}} \cdot \delta \eta_{ijk} \quad (\text{Rel. 3-54})$$

angeschrieben werden und mit der (Rel. 3-36) ein Koeffizientenvergleich bezüglich der virtuellen kinematischen Größen durchgeführt werden, woraus die Bestimmungsgleichungen

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk})}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad \tau_{ijk} = \frac{\partial w}{\partial \eta_{ijk}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk})}{\partial \eta_{ijk}} \quad (\text{Rel. 3-55})$$

für die Spannungstensoren σ_{ij} und τ_{ijk} resultieren. Bei der Verwendung einer deformationstheoretischen Beschreibung kann die freie innere Energiedichtefunktion in Analogie zum Potenzansatz nach Ludwik zur Beschreibung der Fließspannung in folgender Form angeschrieben werden

$$\mathcal{W} := \hat{\mathcal{W}}(\mathcal{E}) := \frac{n}{n+1} \cdot \Sigma_0 \cdot \mathcal{E}_0 \cdot \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_0} \right)^{\frac{n+1}{n}} = \hat{\mathcal{W}}\left(\hat{\mathcal{E}}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l)\right) := \tilde{\mathcal{W}}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l) \quad (\text{Rel. 3-56})$$

wobei es sich gezeigt hat, dass dieses Modell eine sehr gute Approximation für praktische Anwendungsfälle (speziell bei Indentationsvorgängen) darstellt. Die Größen n , Σ_0 und \mathcal{E}_0 in (Rel. 3-56) sind als konstante Materialparameter anzusehen, welche dieselbe Bedeutung aufweisen wie beim ursprünglich Potenzansatz nach Ludwik (bspw. Verfestigungsexponent n). Damit sind die kinematischen sowie die zugeordneten konjugierten Spannungsgrößen definiert und es kann die Impulserhaltungsgleichung innerhalb der „Strain Gradient Theory“ angeschrieben werden, auf deren detaillierte Herleitung hier verzichtet wird:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} = 0_k \quad (\text{Rel. 3-57})$$

Volumenkräfte und Massenträgheitskräfte sind darin unberücksichtigt, womit die Impulsbilanz eine quasistatische Form besitzt. Die Drehimpulserhaltung ist in dieser Bilanzgleichung (Rel. 3-57) bereits enthalten und somit identisch erfüllt. Abschließend soll noch nochmals auf die Verbindung der „Strain Gradient Theory“ zur „Couple-Stress Theory“ etwas genauer eingegangen werden, wobei nun die Überführung der Spannungsgrößen hervorgehoben werden sollen.

Durch die Definitionen der symmetrischen und antisymmetrischen Anteile von Tensoren 3. Stufe, siehe (Rel. 3-38), kann der Zusammenhang zwischen den von sich aus bereits deviatorischen infinitesimalen Krümmungstensor $\chi_{ij} = \chi'_{ij}$, siehe (Rel. 3-5), und den antisymmetrischen Anteil des Verzerrungsgradiententensor η_{ijk}^A wie folgt

$$\eta_{ijk}^A := \eta_{ijk} - \eta_{ijk}^S = \eta_{ijk} - \frac{1}{3} \cdot (\eta_{ijk} + \eta_{jki} + \eta_{kij}) = \frac{2}{3} \cdot e_{ikp} \cdot \chi_{pj} - \frac{2}{3} \cdot e_{jkp} \cdot \chi_{pi} \quad (\text{Rel. 3-58})$$

hergeleitet werden. Die Invertierung dieses Zusammenhangs (Rel. 3-58) kann ebenfalls einfach berechnet werden, woraus sich die Darstellung

$$\chi_{ij} = \frac{1}{2} \cdot e_{iqr} \cdot \eta_{jqr}^A \quad (\text{Rel. 3-59})$$

für den infinitesimalen Krümmungstensor χ_{ij} in Abhängigkeit des antisymmetrischen Anteils des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk}^A ergibt. Aus (Rel. 3-59) ist ersichtlich, dass der antisymmetrische Anteil des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk}^A eine nützliche quantitative Darstellung des infinitesimalen Krümmungstensors χ_{ij} ist, was zusätzlich noch durch die Tatsache fundiert wird, dass jeder dieser Tensoren aufgrund seiner speziellen Eigenschaften (Symmetrieeigenschaften von η_{ijk}^A und verschwindende Spur; $\chi_{ii} = 0$ von χ_{ij}) 8 unabhängige skalare Komponenten besitzt.

Ebenso lässt sich in völlig analoger Weise der Spannungstensor höherer Ordnung τ_{ijk} in einen symmetrischen τ_{ijk}^S und antisymmetrischen Anteil τ_{ijk}^A zerlegen:

$$\tau_{ijk}^S := \frac{1}{3} \cdot (\tau_{ijk} + \tau_{jki} + \tau_{kij}) \quad \tau_{ijk}^A := \tau_{ijk} - \tau_{ijk}^S = \tau_{ijk} - \frac{1}{3} \cdot (\tau_{ijk} + \tau_{jki} + \tau_{kij}) \quad (\text{Rel. 3-60})$$

Reformuliert man die Darstellung der virtuellen Arbeit (Rel. 3-36) mittels der eingeführten symmetrisch-antisymmetrischen Zerlegung des Spannungsgradientensors η_{ijk} sowie des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{ijk} so folgt der Ausdruck

$$\delta \mathcal{W} = \sigma_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} = \sigma_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + (\tau_{ijk}^A + \tau_{ijk}^S) \cdot (\delta \eta_{ijk}^A + \delta \eta_{ijk}^S) \quad (\text{Rel. 3-61})$$

Berücksichtigt man darüber hinaus die Eigenschaft der Orthogonalität von antisymmetrischen Spannungstensoren höherer Ordnung zu seinen zugeordneten symmetrischen Partnern des Verzerrungsgradienten sowie die Umkehrung dieser Eigenschaft

$$\tau_{ijk}^A \cdot \delta \eta_{ijk}^S = 0 \quad \tau_{ijk}^S \cdot \delta \eta_{ijk}^A = 0 \quad (\text{Rel. 3-62})$$

so verschwinden zwei der vier Anteile im Ausdruck (Rel. 3-61) der virtuellen Arbeit, und es folgt die Formulierung

$$\delta w = \sigma_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} = \sigma_{ij} \cdot \delta \varepsilon_{ij} + \tau_{ijk}^A \cdot \delta \eta_{ijk}^A + \tau_{ijk}^S \cdot \delta \eta_{ijk}^S \quad (\text{Rel. 3-63})$$

Aufgrund von (Rel. 3-59) stellt der antisymmetrische Anteil des virtuellen Verzerrungsgradiententensors $\delta \eta_{ijk}^A$ eine quantitative Repräsentation des virtuellen infinitesimalen Krümmungstensors $\delta \chi_{ij}$ dar. Daraus folgt wiederum, dass jener Teil der virtuellen Arbeit, welcher auf den antisymmetrischen Teil des virtuellen Verzerrungsgradiententensors $\delta \eta_{ijk}^A$ innerhalb der „Strain Gradient Theory“ zurückzuführen ist, einem anderen virtuellen Arbeitsanteil innerhalb der „Couple-Stress Theory“ äquivalent zugeordnet werden kann, der letztendlich dem Produkt aus virtuellen infinitesimalen Krümmungstensor $\delta \chi_{ij}$ und dem zugeordneten konjugierten Momentenspannungstensor m_{ij} entspricht. Diese recht komplexe Tatsache ist durch die Äquivalenzrelation

$$\tau_{ijk}^A \cdot \delta \eta_{ijk}^A = m_{ij} \cdot \delta \chi_{ij} \quad (\text{Rel. 3-64})$$

darstellbar. Durch Substitution der Definitionsgleichung des antisymmetrischen Verzerrungsgradiententensors (Rel. 3-58) in obige Gleichung (Rel. 3-64) kann durch weitere Umformungen der Momentenspannungstensor m_{ij} als Funktion des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{ijk} dargestellt werden, wodurch eine Verbindung zwischen der „Couple-Stress Theory“ zur verallgemeinerten „Strain Gradient Theory“ hergestellt ist:

$$m_{jp} = \frac{4}{3} \cdot e_{ikp} \cdot \tau_{jik}^A = \frac{4}{3} \cdot e_{ikp} \cdot \tau_{jik} \quad (\text{Rel. 3-65})$$

Durch analoges Vorgehen sowie unter Verwendung von (Rel. 3-59) zur Substitution in (Rel. 3-64) kann die Inversion von (Rel. 3-65), also die Darstellung des antisymmetrischen Anteils des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{jik}^A als Funktion des Momentenspannungstensors m_{ij} , bestimmt werden:

$$\tau_{jqr}^A = \frac{1}{4} \cdot e_{iqr} \cdot m_{ji} + \frac{1}{4} \cdot e_{ijr} \cdot m_{qi} \quad (\text{Rel. 3-66})$$

In einem letzten Schritt ist noch die Impulserhaltung (Rel. 3-57), über die reformulierte Darstellung der virtuellen Arbeit sowie aus den beiden zuvor ermittelten Zusammenhängen (Rel. 3-65) und (Rel. 3-66), durch Größen aus der „Couple-Stress Theory“ im Rahmen der „Strain Gradient Theory“ darstellbar, womit eine weitere Verbindung zwischen beiden Modellen gegeben ist:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \cdot e_{jlk} \cdot \frac{\partial m_{ij}}{\partial x_i \partial x_l} - \frac{\partial \tau_{ijk}^S}{\partial x_i \partial x_j} = 0_k \quad (\text{Rel. 3-67})$$

Damit sind die wichtigsten Teile und Merkmale der „Strain Gradient Theory“ dargestellt sowie die Verbindungen bzw. Gemeinsamkeiten zur „Couple-Stress Theory“ aufgezeigt.

3.3 Mechanism Based Strain Gradient Plasticity

Diese Theorie basiert in einigen Teilen auf der im vorigen Abschnitt dargelegten „Strain Gradient Theory“ (Fleck & Hutchinson, Strain Gradient Plasticity, 1997), wobei in der nun vorgestellten „Mechanism based Strain Gradient Theory“ (Gao, Huang, Nix, & Hutchinson, 1999), (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999) die verwendeten Ansätze zur Beschreibung des Werkstoffverhaltens nicht mehr rein phänomenologischer Natur sondern aus Modellen der Mikrostruktur abgeleitet sind. Die wichtigsten Ansätze zur Entwicklung des Modells werden einleitend kurz angeführt und im Folgenden dann genauer beschrieben.

- I. Die bei der Definition des effektiven Gesamtverzerrungsmaßes $\mathcal{E} = \widehat{\mathcal{E}}$ (Rel. 3-37), welche auch als quantifizierende Größe der Gesamtversetzungsdichte ρ interpretierbar ist, eingeführte intrinsische Länge l ist hier nicht mehr ein anzupassender konstanter Materialparameter, sondern wird durch das mikromechanisch motivierte Taylormodell analytisch hergeleitet und in weiterer Folge durch andere Materialparameter festgelegt.
- II. Die an Experimente anzupassenden Vorfaktoren in den zur Beschreibung der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g eingeführten effektiven Verzerrungsgradienten η_e (vgl. (Rel. 3-44) bzw. (Rel. 3-45)) werden aus repräsentativen Modellbelastungen bestimmt, welche die Versetzungsdichten der Mikrostruktur charakterisieren sowie quantifizieren.

- III. Das Konzept zur Ermittlung des konstitutiven Materialmodells geht nicht mehr von einem Potenzial aus, welches durch die Deformationsgrößen eine freie innere Energiedichtefunktion (vgl. (Rel. 3-52) bis (Rel. 3-55)) beschreibt, sondern basiert auf einen Homogenisierungsansatz der die Mikrostruktur der Versetzungsbewegung miteinbezieht.

Diese mikrostrukturell motivierten Modellansätze werden in den konzeptionellen Rahmen der phänomenologischen "Strain Gradient Theory" eingebettet, wodurch ein rein kontinuumsmechanisches Modell resultiert, das im Kern die Deformationsvorgänge auf der Ebene der Versetzungsbewegungen berücksichtigen kann.

Eine zentrale Grundlage (siehe Punkt I) der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ ist das sogenannte Taylor-Modell (Rel. 2-99), welches die zur Versetzungsbewegung notwendige Schubspannung mit der im Material vorliegend Versetzungsdichte in Beziehung setzt. Berücksichtigt man, dass die Gesamtversetzungsdichte ρ die Summe aus statistisch verteilter Versetzungsdichte ρ_s und geometrisch notwendiger Versetzungsdichte ρ_g ist, kann das Taylorgesetz wie folgt geschrieben werden:

$$\tau = \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho} = \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_s + \rho_g} \quad (\text{Rel. 3-68})$$

Nach den Ausführungen in Abschnitt 2.2.2 liegt es nahe, dass Inkompatibilitäten im diskreten Kristallsystem, welche durch Gradienten im Verzerrungsfeld existent sind, durch die geometrisch notwendige Versetzungen aufgenommen werden. Daraus resultierend kann der effektive Verzerrungsgradient η_e mit dem Burgersvektor b und der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte ρ_g in Beziehung gesetzt werden:

$$\eta_e := \rho_g \cdot b \quad (\text{Rel. 3-69})$$

Unter Verwendung einer deformationstheoretischen Beschreibung und der eindimensionalen effektiven „von Mises“-Vergleichsspannung

$$\sigma = \sqrt{3} \cdot \tau \quad (\text{Rel. 3-70})$$

welche die zur Versetzungsbewegung notwendige tangentielle Schubspannung in eine entsprechende Normalspannung umrechnet, kann das Taylormodell (Rel. 3-68)

$$\sigma = \sqrt{3} \cdot \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_s + \frac{\eta_e}{b}} \quad (\text{Rel. 3-71})$$

reformuliert werden. Prinzipiell handelt es sich bei der Taylorspannung um eine Mindestschubspannung zur Versetzungsbewegung, was wiederum einer plastischen Deformation entspricht und demzufolge ein Fließen des Werkstoffs darstellt. Deshalb repräsentiert die der Taylorspannung zugeordnete Normalspannung eine Fließspannung, weshalb es wegen der vorausgesetzten deformationstheoretischen Beschreibung zweckmäßig ist, die Abhängigkeit der Fließspannung σ von der effektiven Verzerrung ε_e , welche die plastischen Dehnungen quantifiziert, wie folgt zu formulieren:

$$\sigma = \hat{\sigma}(\varepsilon_e) := \sigma_Y \cdot \hat{f}(\varepsilon_e) = \sigma_Y \cdot f \quad (\text{Rel. 3-72})$$

Darin kann die Größe σ_Y als ein konstanter makroskopischer Materialparameter, nämlich eine Art Anfangsfließspannung, angesehen werden, und die Funktion f beschreibt die Verfestigung in Abhängigkeit der plastischen Verformung. Geht man von der Annahme aus, dass im Material keine Verzerrungsgradienten existent sind, wie dies beispielsweise bei den homogenen Deformationszuständen eines Zugversuchs vorliegt, so werden plastische Deformation ausschließlich durch die Bewegungen der statistisch verteilten Versetzungen (ρ_s) ermöglicht. Unter diesen Umständen kann die allgemeine Taylorspannung (Rel. 3-71) zur Beschreibung von Versetzungsbewegungen wegen der verschwindenden geometrisch notwendigen Versetzungsdichte $\rho_g = 0$ vereinfacht werden:

$$\sigma = \sqrt{3} \cdot \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_s} \quad (\text{Rel. 3-73})$$

Durch Gleichsetzung der beiden Beziehungen (Rel. 3-71) bzw. (Rel. 3-73) zur Beschreibung der Versetzungsbewegungsspannung sowie unter Verwendung von (Rel. 3-72)

$$\sigma = \sigma_Y \cdot \hat{f}(\varepsilon_e) = \sqrt{3} \cdot \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_s + \frac{\eta_e}{b}} = \sqrt{3} \cdot \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho_s} \quad (\text{Rel. 3-74})$$

folgt ein Zusammenhang mit dem die Fließspannung σ auf der Mikroskala als Funktion der effektiven Verzerrung ε_e und dessen Gradienten η_e dargestellt ist:

$$\sigma = \sigma_Y \cdot \sqrt{\hat{f}^2(\varepsilon_e) + l \cdot \eta_e} \quad \text{mit} \quad l = 3 \cdot \alpha^2 \cdot \left(\frac{G}{\sigma_Y}\right)^2 \cdot b \quad (\text{Rel. 3-75})$$

Vergleicht man die Struktur der obigen Gleichung (Rel. 3-75) mit jener von (Rel. 3-37) wie nachfolgend dargestellt

$$\frac{\sigma}{\sigma_Y} = \sqrt{\hat{f}^2(\varepsilon_e) + l \cdot \eta_e} \Leftrightarrow \varepsilon := \hat{\varepsilon}(\varepsilon_{ij}, \eta_{ijk}; l) := \sqrt{\varepsilon_e^2 + l^2 \cdot \eta_e^2} \quad (\text{Rel. 3-76})$$

so erkennt man darin eine Analogie bezüglich der Verknüpfung der 1. Terme, welche die statistisch verteilten Versetzungen quantifizieren, und der 2. Terme, welche die geometrisch notwendigen Versetzungen quantifizieren. Damit ist eine signifikante Verbindung von der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ zur rein phänomenologischen „Strain Gradient Theory“ gegeben. Zudem ist die charakteristische intrinsische Länge l nun eindeutig durch andere Materialkonstanten determiniert und somit kein freier Parameter mehr. Besonders letzte Aussage stellt einen wesentlich Fortschritt gegenüber den zuvor erläuterten Modellen dar.

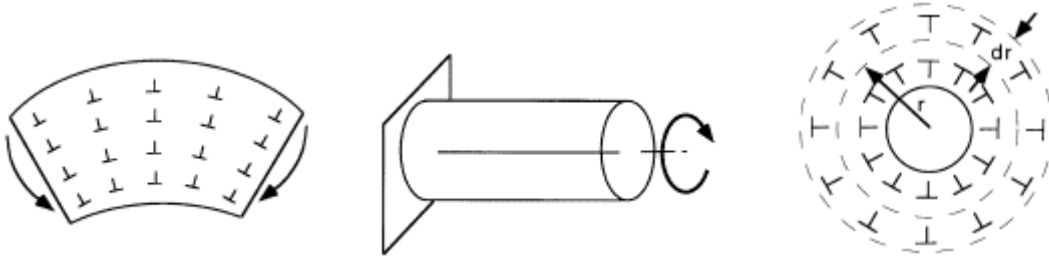


Bild 3-1: Elementare Belastungsmodelle zur Ermittlung geometrisch notwendiger Versetzungsdichten (Gao, Huang, Nix, & Hutchinson, 1999): reine Biegung (links), reine Torsion (mitte), axialsymmetrisches ebenes Leerstellenwachstum (rechts)

Eine weitere zentrale Basis (siehe Punkt II) der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ stellt die analytische Bestimmung der Koeffizienten für die Darstellung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e in der Form von (Rel. 3-44) mit Hilfe elementarer Modelle dar. Resultierend aus der Deformationskinematik und den damit verbundenen geometrisch notwendigen Versetzungsdichten ρ_g können anhand der reinen Biegung, der reinen Torsion sowie am ebenen axialsymmetrischen Wachstum von Leerstellen Bestimmungsgleichungen extrahiert und zur detaillierteren Quantifizierung des Deformationszustandes verwendet werden. Der Annahme dieser elementaren Belastungsmodelle liegt die Tatsache zugrunde, dass die aus der Deformationskinematik resultierende geometrisch notwendige Versetzungsdichte stets den Zustand einer minimal möglichen annimmt. In realen Kristallsystemen sind ja meist mehrere Gleitsysteme vorhanden, aus denen je nach äußerer Belastung in Bezug zur vorliegenden Kristallorientierung unterschiedliche geometrisch notwendige Versetzungsdichten folgen können. Im Folgenden werden diese 3 Modelle genauer beschrieben.

Für die reine Biegung (x_1 ...Balkenachsenrichtung, x_2 ...normal zu x_1) wird von einem ebenen Verzerrungszustand (x_3 ...normal zur betrachteten Ebene) eines Kristalls ausgegangen, der durch die gegebene Krümmung belastet ist (siehe Bild 3-1 links), wobei die Krümmung über (Rel. 3-59) und die einfache Deformationskinematik durch den Verzerrungsgradienten quantifiziert wird (Ashby, 1970), (Nye, 1953). Daraus resultierend kann die geometrisch notwendige Versetzungsdichte ρ_g für diesen einfachen Fall mittels (Rel. 3-69) ermittelt werden:

$$\kappa_e = \eta_e \quad \rho_g = \frac{\eta_e}{b} = \frac{\kappa_e}{b} \quad (\text{Rel. 3-77})$$

Wegen des ebenen Deformationszustandes kann das analytische Verschiebungsfeld der reinen Biegung für homogene konstante Krümmung κ_e durch folgendes Vektorfeld festgelegt werden (lineare Verteilung der Verzerrungen über die Balkenhöhe):

$$u_1 = \kappa_e \cdot x_1 \cdot x_2 \quad u_2 = -\frac{1}{2} \cdot (x_1^2 + x_2^2) \quad (\text{Rel. 3-78})$$

Daraus können wiederum die von Null verschiedenen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk} ermittelt werden

$$\eta_{112} = -\kappa_e \quad \eta_{211} = \eta_{121} = \kappa_e \quad \eta_{222} = -\kappa_e \quad (\text{Rel. 3-79})$$

woraus in weiterer Folge die Ausdrücke der einzelnen quadratischen Summanden innerhalb des effektiven Verzerrungsgradienten η_e , welche die quadratischen Invarianten von η_{ijk} darstellen, berechenbar sind:

$$\eta_{iik} \cdot \eta_{jjk} = 4 \cdot \kappa_e^2 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{ijk} = 4 \cdot \kappa_e^2 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{kji} = 0 \quad (\text{Rel. 3-80})$$

Setzt man die für die reine Biegung ermittelten Ausdrücke (Rel. 3-80) und (Rel. 3-77) in die Darstellung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e (Rel. 3-44) ein, so folgt die 1. Bestimmungsgleichung zur Ermittlung der gesuchten Koeffizienten.

$$c_1 + c_2 = \frac{1}{4} \quad (\text{Rel. 3-81})$$

Für die reine Torsion (siehe Bild 3-1 Mitte) eines zylindrischen Ausschnitts mit dem Radius r geht man von der idealisierten Annahme aus, dass sich eine koaxiale Schraubenversetzung in der Rotationsachse (x_1 -Richtung) des betrachteten Bereichs befindet. Betrachtet man die Torsionsquerschnittsfläche bezüglich eines Koordinatensystems dessen Ursprung auf der Rotationsachse liegt, so kann die Versetzungsdichte nach der Definition (Rel. 2-83) einfach angegeben werden. Da die Versetzungslinie offensichtlich normal zum betrachteten Querschnitt liegt, ist die flächenbezogene (Rel. 2-83) mit der volumenbezogenen (Rel. 2-82) Versetzungsdichte identisch (siehe Abschnitt 2.2.2.1), wobei der Durchstoßpunkt der Versetzungslinie direkt im Ursprung des zuvor festgelegten Koordinatensystems liegt. Da sich die Versetzungsdichte auf einen kreisförmigen Querschnitt mit dem Mittelpunkt im Ursprung des gewählten Koordinatensystems sowie dem beliebig wählbaren Radius r bezieht, muss für einen verschwindend kleinen Querschnitt ($r \rightarrow 0$) die geometrisch notwendige Versetzungsdichte gegen unendlich tendieren ($\rho_g \rightarrow \infty$), was auch konsistent durch die Definition (Rel. 2-83) der flächenbezogenen (hier geometrisch notwendigen) Versetzungsdichte ρ_g abgebildet wird. Damit kann die Versetzungsdichte wie folgt angeschrieben werden:

$$\rho_g = \frac{n}{A} = \frac{1}{\pi \cdot r^2} \quad (\text{Rel. 3-82})$$

Aus Definitionsgleichung (Rel. 3-69) und (Rel. 3-82) ist schließlich der effektive Verzerrungsgradient η_e eines zylindrischen Bereichs bei reiner Torsion für eine koaxiale Schraubenversetzung in der Rotationsachse ermittelbar.

$$\rho_g = \frac{\eta_e}{b} \quad \eta_e = b \cdot \rho_g = \frac{b}{\pi \cdot r^2} \quad (\text{Rel. 3-83})$$

Das Verschiebungsfeld bezüglich des eingeführten kartesischen Koordinatensystems, das sich im Belastungsquerschnitt befindet und dessen Ursprung auf der Achse der Schraubenversetzung liegt, wurde bereits von (Eshelby, 1953) und (Hirth & Lothe, 1982) hergeleitet und kann analytisch durch folgendes Vektorfeld angegeben werden.

$$u_1 = -\kappa_e \cdot x_2 \cdot x_3 \quad u_2 = \kappa_e \cdot x_1 \cdot x_3 \quad \kappa_e = \frac{b}{\pi \cdot r^2} \quad (\text{Rel. 3-84})$$

Darin stellt das Symbol κ_e die Verdrillung (Twist) dar, die ihrer Größe nach laut (Rel. 3-83) und (Rel. 3-84) mit dem effektiven Verzerrungsgradienten η_e identisch ist:

$$\eta_e = b \cdot \rho_g = \frac{b}{\pi \cdot r^2} = \kappa_e \quad (\text{Rel. 3-85})$$

Damit können analog zur reinen Biegung die von Null verschiedenen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk} bestimmt werden:

$$\eta_{231} = \eta_{321} = -\kappa_e \quad \eta_{132} = \eta_{312} = \kappa_e \quad (\text{Rel. 3-86})$$

In weiterer Folge sind die Ausdrücke der einzelnen quadratischen Summanden innerhalb des effektiven Verzerrungsgradienten η_e berechenbar, welche die quadratischen Invarianten von η_{ijk} darstellen.

$$\eta_{iik} \cdot \eta_{jjk} = 0 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{ijk} = 4 \cdot \kappa_e^2 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{kji} = -2 \cdot \kappa_e^2 \quad (\text{Rel. 3-87})$$

Setzt man wie zuvor die für die reine Torsion ermittelten Ausdrücke (Rel. 3-87) und (Rel. 3-85) in die Darstellung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e (Rel. 3-44) ein, so folgt die 2. Bestimmungsgleichung zur Ermittlung der gesuchten Koeffizienten:

$$c_2 - \frac{1}{2} \cdot c_3 = \frac{1}{4} \quad (\text{Rel. 3-88})$$

Das Wachstum von Leerstellen in Zusammenhang mit den vorhandenen geometrisch notwendigen Versetzungsdichten ρ_g , soll abschließend noch unter Verwendung eines geeigneten einfachen Modells untersucht und in die Theorie eingebunden werden, wobei der Terminus Leerstelle bzw. Pore als synonyme Begrifflichkeiten Verwendung finden. Die Entstehung (Nukleation), das Wachstum sowie die der Vereinigung (Koaleszenz) von Poren ist ein für duktile Materialien zentraler Mechanismus im Kontext von Schädigungs- aber auch Bruchvorgängen. Dieses Phänomen wurde bereits im Kontext mehrerer klassischer (skalenunabhängiger) Plastizitätsmodelle untersucht und beschrieben (Gurson, 1977), (Gologanu, Leblond, & Devaux, 1993), (Gologanu, Leblond, & Devaux, 1994), (Kailasam, Aravas, & Ponte Castaneda, 2000). Theorie und Modelle zur Beschreibung des Verhaltens von Leerstellen bzw. Poren unterschiedlicher Geometrie bei rein elastischem aber auch bei (elastisch-) plastischen Matrixmaterial sind ausreichend untersucht und publiziert (Rice & Tracey, 1969), (Tvergaard, 1990), (Huang, Hutchinson, & Tvergaard, 1991), (Needleman, Tveergard, & Hutchinson, 1992), wobei hauptsächlich zweidimensionale kreis- oder elliptische- aber auch dreidimensionale zylindrische,- kugel- und ellipsoide Porenformen analysiert worden sind. In der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ wird eine axialsymmetrische, in Längsrichtung unendlich ausgedehnte, Leerstelle in Bezug auf radialsymmetrisch angeordneten Versetzungen (siehe Bild 3-1 rechts) untersucht, wobei sich diese Aufgabenstellung durch die Art des Problems auf zwei Raumdimensionen reduziert. Die z-Achse des zur Darstellung des Problems benutzten Zylinderkoordinatensystems (r, φ, z) ist coaxial zur zylindrischen Leerstelle und liegt direkt in dessen Zentrum. Zudem liegt die Leerstelle in einer unendlich ausgedehnten Matrix und ist radialsymmetrisch mit einer Spannung σ_{rr}^∞ belastet. Das Matrixmaterial ist als inkompressibel angenommen, wobei das Gesamtproblem als ebener Verzerrungszustand betrachtet wird. Unter diesen Bedingungen kann nach (Rice & Tracey, 1969), (Tvergaard, 1990), (Huang, Hutchinson, & Tvergaard, 1991) das axialsymmetrische Verschiebungsfeld durch das folgende Vektorfeld analytisch angegeben werden

$$u_r = \frac{r_0}{r} \cdot u_0 \quad u_\varphi = 0 \quad u_z = 0 \quad (\text{Rel. 3-89})$$

wobei die Größen r_0 den Ausgangsradius und u_0 die Verschiebung am Rand der zylindrischen Leerstelle sind. Für das hier speziell formulierte Modell erhält man durch Darstellung mittels zylindrischer Koordinaten für die von Null verschiedenen Komponenten des infinitesimalen Verzerrungstensors ε_{ij} (Keiðig & Benedix, 2002) folgende Ausdrücke:

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} & \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} & \frac{u_r}{r} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} & \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{Rel. 3-90})$$

Durch Auswertung der allgemeinen Beziehung (Rel. 3-90) mittels (Rel. 3-89) erhält man schließlich die nichtverschwindenden gesuchten Größen des infinitesimalen Verzerrungstensors ε_{ij} bezüglich des gewählten Zylinderkoordinatensystems.

$$\varepsilon_{ij} = \frac{r_0}{r^2} \cdot u_0 \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \varepsilon_{rr} = -\frac{r_0}{r^2} \cdot u_0 \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{r_0}{r^2} \cdot u_0 \quad (\text{Rel. 3-91})$$

Damit sind die wesentlichen Terme ermittelt und es können die von Null unterschiedlichen Komponenten des Verzerrungsgradiententensors η_{ijk} bestimmt werden, wobei darauf zu achten ist, dass sowohl die Darstellung des räumlichen Gradienten ${}_c \nabla_i$

$${}_c \nabla := \left[\frac{\partial}{\partial r} \quad \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \frac{\partial}{\partial z} \right] \quad {}_c \nabla_1 = \frac{\partial}{\partial r} \quad {}_c \nabla_2 = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad {}_c \nabla_3 = \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{Rel. 3-92})$$

als auch jene des Verzerrungstensor ε (Rel. 3-90) in Zylinderkoordinaten vorliegen muss. Somit kann der Verzerrungsgradiententensor η in Zylinderkoordinaten wie folgt ermittelt

$$\eta := {}_c \nabla \epsilon = \left[\frac{\partial}{\partial r} \quad \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \frac{\partial}{\partial z} \right] \otimes \begin{bmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{Rel. 3-93})$$

sowie dessen von Null verschiedenen Komponenten η_{ijk} berechnet werden:

$$\eta_{rrr} = 2 \cdot \frac{r_0}{r^3} \cdot u_0 \quad \eta_{r\varphi\varphi} = \eta_{\varphi r\varphi} = \eta_{\varphi\varphi r} = -2 \cdot \frac{r_0}{r^3} \cdot u_0 \quad (\text{Rel. 3-94})$$

Daraus sind in weiterer Folge die Ausdrücke der einzelnen quadratischen Summanden innerhalb des effektiven Verzerrungsgradienten η_e , welche die quadratischen Invarianten von η_{ijk} darstellen, berechenbar:

$$\eta_{iik} \cdot \eta_{jjk} = 0 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{ijk} = 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 \quad \eta_{ijk} \cdot \eta_{kji} = 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 \quad (\text{Rel. 3-95})$$

Schließlich kann der effektive Verzerrungsgradient η_e (Rel. 3-44) durch (Rel. 3-95) wie folgt durch seine Koeffizienten angeschrieben werden:

$$\eta_e^2 = c_1 \cdot 0 + c_2 \cdot 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 + c_3 \cdot 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 = 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 \cdot (c_2 + c_3) \quad (\text{Rel. 3-96})$$

Bisher wurde nur die Kinematik des Deformationsfeldes einer Leerstelle betrachtet ohne jedoch die umgebende Versetzungsstruktur in Betracht zu ziehen, was in den nun folgenden Ausführungen berücksichtigt wird.

Durch die idealisierte radiale Anordnung von Stufenversetzungen in konzentrischen Kreisen rund um die Leerstelle (siehe Bild 3-1 rechts), kann die flächenbezogene (geometrisch notwendige) Versetzungsdichte ρ_g (Rel. 2-83) bezüglich eines infinitesimal dünnen Kreisringes der Breite dr und dem Radius r für die vorhandene Anzahl von n Versetzungslinien wie folgt angeschrieben und in differentieller Weise formuliert werden:

$$\rho_g = \frac{n}{A} \Rightarrow \rho_g = \frac{dn}{dA} \quad dA = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad \rho_g = \frac{dn}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr} \Rightarrow dn = \rho_g \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr \quad (\text{Rel. 3-97})$$

Da die Versetzungslinien offensichtlich normal zum betrachteten Querschnitt liegen, ist die flächenbezogene (Rel. 2-83) mit der volumenbezogenen (Rel. 2-82) Versetzungsdichte auch in diesem betrachteten Fall (vgl. Torsion) identisch (siehe Abschnitt 2.2.2.1). Jede einzelne Stufenversetzung entlang des betrachteten unendlich dünnen Kreisrings verursacht entlang seiner Umfangsrichtung eine Längenänderung um den Betrag des Burgersvektor b (siehe Abschnitt 2.2.2.1). Da sich entlang dieses konzentrisch angeordneten und unendlich dünnen Kreisrings (siehe Bild 3-1 rechts) laut geometrisch notwendiger Versetzungsdichtedefinition (Rel. 3-97) n Stufenversetzungen befinden, kann die Verschiebung in Umfangsrichtung $u_{\varphi\varphi}$, was der Längenänderung des Kreisrings entspricht, wie folgt angegeben und in differentieller Form gebracht werden. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, dass durch die radial angeordneten Stufenversetzungen Druckspannungen in Umfangsrichtung aufgebaut werden, was sich durch das negative Vorzeichen der gerichteten Größe des Burgersvektors manifestiert:

$$u_{\varphi\varphi} = -b \cdot n \Rightarrow du_{\varphi\varphi} = -b \cdot dn \Rightarrow b = -\frac{du_{\varphi\varphi}}{dn} \quad (\text{Rel. 3-98})$$

Bezieht man diese Längenänderung in Umfangsrichtung $u_{\varphi\varphi}$ (Rel. 3-98) auf den Umfang des betrachteten, unendlich dünnen Kreisrings so resultiert daraus die Dehnung in Umfangsrichtung, welche wiederum wie folgt festgelegt ist und in differentieller Form gebracht werden kann:

$$\varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{u_{\varphi\varphi}}{2 \cdot \pi \cdot r} \Rightarrow d\varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{du_{\varphi\varphi}}{2 \cdot \pi \cdot r} \Rightarrow du_{\varphi\varphi} = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot d\varepsilon_{\varphi\varphi} \quad (\text{Rel. 3-99})$$

Setzt man nun dn (Rel. 3-97) und $du_{\varphi\varphi}$ (Rel. 3-98) in die Gleichung der Dehnung (Rel. 3-99) ein, so folgt

$$d\varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{du_{\varphi\varphi}}{2 \cdot \pi \cdot r} = \frac{-b \cdot dn}{2 \cdot \pi \cdot r} = -\frac{b \cdot \rho_g \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot dr}{2 \cdot \pi \cdot r} = -b \cdot \rho_g \cdot dr \quad (\text{Rel. 3-100})$$

$$\frac{d\varepsilon_{\varphi\varphi}}{dr} = -b \cdot \rho_g \Rightarrow \rho_g = -\frac{1}{b} \cdot \frac{d\varepsilon_{\varphi\varphi}}{dr}$$

Damit kann wiederum aus der Definitionsgleichung des effektiven Verzerrungsgradienten η_e (Rel. 3-69) dieser durch die partiellen Ableitung der Verzerrungen

$$\eta_e := \rho_g \cdot b \Rightarrow \rho_g = \frac{\eta_e}{b} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{d\varepsilon_{\varphi\varphi}}{dr} \Rightarrow \eta_e = -\frac{\partial \varepsilon_{\varphi\varphi}}{\partial r} \quad (\text{Rel. 3-101})$$

ausgedrückt werden. Durch Auswertung dieser Beziehung (Rel. 3-101) und mit Hilfe des Verzerrungsfeldes der zylindrischen Leerstelle (Rel. 3-91) folgt schließlich der Ausdruck des effektiven Verzerrungsgradienten η_e

$$\eta_e = -\frac{\partial \varepsilon_{\varphi\varphi}}{\partial r} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r_0}{r^2} \cdot u_0 \right) \Rightarrow \eta_e = 2 \cdot \frac{r_0}{r^3} \cdot u_0 \quad (\text{Rel. 3-102})$$

aus dem wiederum zusammen mit (Rel. 3-96) die 3. Bestimmungsgleichung zur Ermittlung der gesuchten Koeffizienten resultiert:

$$\eta_e^2 = 16 \cdot \frac{r_0^2}{r^6} \cdot u_0^2 \cdot (c_2 + c_3) = \left(2 \cdot \frac{r_0}{r^3} \cdot u_0 \right)^2 \Rightarrow c_2 + c_3 = \frac{1}{4} \quad (\text{Rel. 3-103})$$

Bemerkenswert an diesen Ausführungen zum axialsymmetrischen Wachstum von Leerstellen ist die Verbindung der Verzerrungskinetik von Poren mit versetzungstheoretischen Überlegungen, wodurch eine Verbindung beider Ansätze zu einem einheitlichen Modell resultiert. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich die durch die radialsymmetrisch angreifenden Zugspannungen σ_{rr}^∞ bewirkte Vergrößerung der Leerstelle durch die ebenfalls radial angeordneten Stufenversetzung um die Pore entsprechend erschwert wird, da diese zusätzliche Druckspannungen in Umfangsrichtung induzieren.

Schließlich müssen noch die aus den 3 Modellen (reine Biegung, reine Torsion, axialsymmetrisches Leerstellenwachstum) erhaltenen Bestimmungsgleichungen zur Ermittlung der Komponenten im effektiven Verzerrungsgradienten η_e gelöst werden. Dazu ist das lineare Gleichungssystem aus (Rel. 3-81), (Rel. 3-88) und (Rel. 3-103) heranzuziehen, woraus die Koeffizienten bestimmt werden.

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= \frac{1}{4} & c_2 - \frac{1}{2} \cdot c_3 &= \frac{1}{4} & c_2 + c_3 &= \frac{1}{4} \\ c_1 &= 0 & c_2 &= \frac{1}{4} & c_3 &= 0 \end{aligned} \quad (\text{Rel. 3-104})$$

Damit kann der effektive Verzerrungsgradient η_e der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ angeschrieben werden:

$$\eta_e^2 = c_1 \cdot \eta_{iik} \cdot \eta_{jjk} + c_2 \cdot \eta_{ijk} \cdot \eta_{ijk} + c_3 \cdot \eta_{ijk} \cdot \eta_{kji} = \frac{1}{4} \cdot \eta_{ijk} \cdot \eta_{ijk} \quad (\text{Rel. 3-105})$$

An dieser Stelle ist es essentiell anzumerken, dass sich dieser Ausdruck (Rel. 3-105) gut in die Varianten der „Strain Gradient Theory“ einfügt, obwohl im zuletzt genannten Modell die Koeffizienten zur Bestimmung des effektiven Verzerrungsgradienten freie konstante Materialparameter darstellen, die an Experimente angepasst werden müssen.

Abschließend sei noch erwähnt, dass sich jede durch äußere Belastungen im Bauteil einstellende Kinetik des Verzerrungsgradienten mehr oder weniger gut mittels der hier verwendeten Kombination aus diesen 3 Modellen (reine Biegung, reine Torsion, axialsymmetrisches Leerstellenwachstum) approximieren lässt.

Als letztes müssen noch die konstitutiven Gleichungen für die Spannungen σ_{ij} und τ_{ijk} dargestellt werden. Wie einleitend erwähnt, werden die zu bestimmenden Spannungen σ_{ij} und τ_{ijk} nicht wie bei der „Strain Gradient Theory“ über die Verwendung des Potenzials einer freien Energiedichtefunktion $\mathcal{W} := \hat{\mathcal{W}}$ der effektiven Verzerrung $\mathcal{E} = \hat{\mathcal{E}}$ ermittelt, sondern durch einen mikrostrukturell motivierten Mehrskalenansatz (Bild 3-2) hergeleitet (vgl. siehe Punkt III). Dabei geht man von der speziell für die „Mechanism based Strain Gradient Theory“ entwickelten Form des Taylormodells (Rel. 3-75) aus. Durch eine Homogenisierung (vgl. Abschnitt 2.3) der durch die Fließspannungsbeziehung geleisteten plastischen Arbeit in einer sich auf der Ebene der Mesoskala befindlichen Zelle (Zelle zwischen Mikro- und Makroskala oder kurz Mesozelle, vgl. Bild 3-2), welche oft auch allgemeiner als repräsentatives Volumelement bezeichnet wird, ist eine explizite konstitutive Darstellung der Spannungen herleitbar.

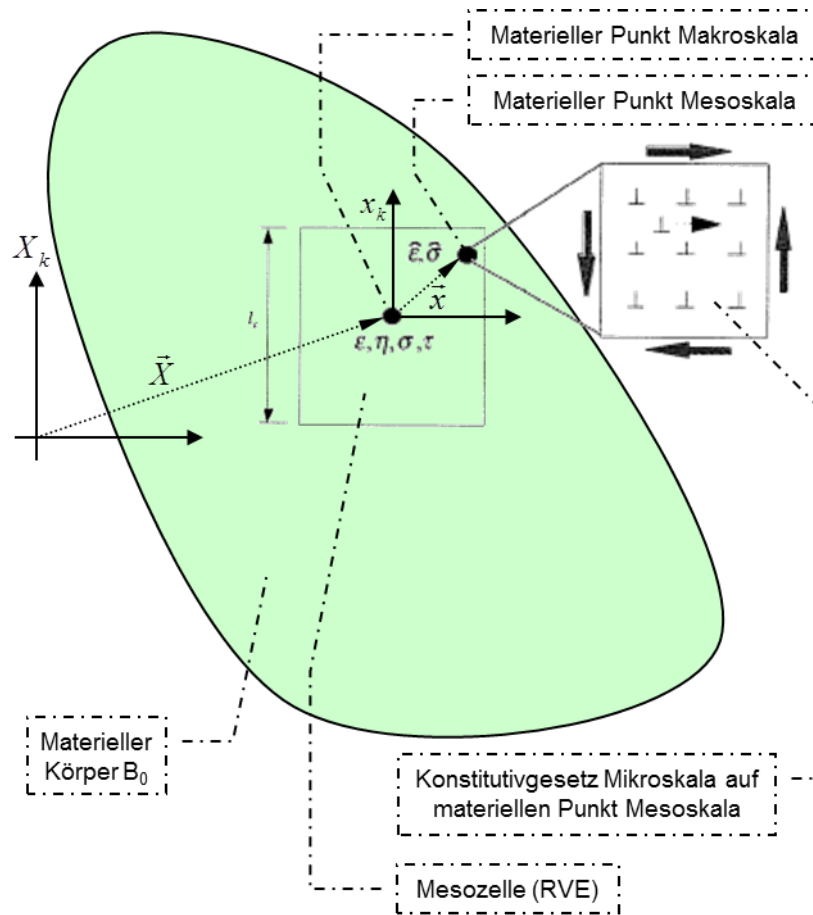


Bild 3-2: Elementare Darstellung des Mehrskalenmodells zur Ermittlung der Konstitutivbeziehungen

Durch den Mehrskalenansatz der Homogenisierung und mit Hilfe der Äquivalenz der plastischen Arbeit werden im Folgenden alle Größen welche sich auf die Ebene der Mikroskala beziehen mit einer Schlangenlinie $\tilde{\cdot}$ über dem verwendeten Symbol gekennzeichnet. Da die Homogenisierung über einen Integrationsprozess durchgeführt wird, hat die Meso- und Mikroskala die Form eines Würfels damit die Integrationsgrenzen bei Verwendung der lokalen kartesischen Koordinaten \tilde{x}_l konstant bleiben. Die Orientierung und Lage des lokalen Koordinatensystems \tilde{x}_l auf Ebene der Mikroskala ist so gewählt, dass die Koordinatenrichtungen parallel zu den Kanten und der Ursprung im Mittelpunkt 0x_l des Würfels liegen. Damit lässt sich die lineare Koordinatentransformation von der Makro- (x_l) über die Meso- (0x_l) zur Mikroskala (\tilde{x}_l) wie folgt angeben.

$$x_l = \hat{x}_l(\tilde{x}_p) = {}^0x_l + \tilde{x}_l \quad (\text{Rel. 3-106})$$

Die Kantenlänge der würfelförmigen Meso- und Mikroskala ist mit l_ε gegeben. Unter diesen Annahmen kann das Verschiebungsfeld auf Ebene der Mikroskala in Form einer Taylorreihe mit dem Mittelpunkt der Meso- und Mikroskala als Entwicklungspunkt

$$x_l = \hat{x}_l(\tilde{x}_p = 0_p) = {}^0x_l \quad (\text{Rel. 3-107})$$

dargestellt werden

$$\tilde{u}_k(\tilde{x}_l) = u_k({}^0x_l) + \frac{\partial u_k({}^0x_l)}{\partial x_i} \cdot \tilde{x}_i + \frac{\partial^2 u_k({}^0x_l)}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \tilde{x}_i \cdot \tilde{x}_j + R_k \quad (\text{Rel. 3-108})$$

wobei R_k das Restglied repräsentiert, das aus dem Abbruch nach dem quadratischen Summanden resultiert. Bildet man aus der Taylorreihenentwicklung 2. Grades den Gradienten des Verschiebungsfeldes

$$\tilde{H}_{kl} = \frac{\partial \tilde{u}_k(x_j)}{\partial x_l} = \frac{\partial}{\partial x_l} \left(u_k({}^0x_j) + \frac{\partial u_k({}^0x_j)}{\partial x_i} \cdot \tilde{x}_i \right) = \frac{\partial u_k({}^0x_j)}{\partial x_l} + \frac{\partial^2 u_k({}^0x_j)}{\partial x_l \partial x_i} \cdot \tilde{x}_i \quad (\text{Rel. 3-109})$$

so resultiert aus dem symmetrischen Anteil des Verschiebungsgradienten \tilde{H}_{kl}

$$\tilde{H}_{kl}^s = \tilde{\varepsilon}_{kl} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_k(^0x_j)}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l(^0x_j)}{\partial x_k} + \frac{\partial^2 u_k(^0x_j)}{\partial x_l \partial x_i} \cdot \tilde{x}_i + \frac{\partial^2 u_l(^0x_j)}{\partial x_k \partial x_i} \cdot \tilde{x}_i \right) \quad (\text{Rel. 3-110})$$

folgende lineare Approximation des Verzerrungsfeldes innerhalb der Mesozelle,

$$\tilde{\varepsilon}_{kl} = \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} \cdot (\eta_{ilk} + \eta_{ikl}) \cdot \tilde{x}_i \quad (\text{Rel. 3-111})$$

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial u_k(^0x_p)}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l(^0x_p)}{\partial x_k} \right) \quad \eta_{ijk} = \frac{\partial^2 u_k(^0x_p)}{\partial x_j \partial x_i}$$

die den Verzerrungstensor ε_{kl} aber auch dessen Gradienten η_{ijk} mit berücksichtigt. Mit (Rel. 3-111) ist eine Verknüpfung zwischen der kinematischen Größe $\tilde{\varepsilon}_{kl}$ auf der Mikroebene über die Mesozelle zu den kinematischen Größen ε_{kl} und η_{ikl} auf der Makroskala gegeben, was eine Voraussetzung für die Homogenisierung darstellt. Unter Verwendung der zur kinematischen Größe $\tilde{\varepsilon}_{ij}$ zugeordneten konjugierten Spannung $\tilde{\sigma}_{ij}$ kann die volumenbezogene virtuelle Arbeit auf der Mikroskala formuliert werden

$$\delta \tilde{\mathcal{W}} = \tilde{\sigma}_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \quad \text{mit} \quad \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial \delta \tilde{u}_i(\tilde{x}_p)}{\partial \tilde{x}_j} + \frac{\partial \delta \tilde{u}_j(\tilde{x}_p)}{\partial \tilde{x}_i} \right) \quad (\text{Rel. 3-112})$$

wobei aus den beliebig wählbaren kompatiblen virtuellen Verschiebungen $\delta \tilde{u}_i(\tilde{x}_p)$ die entsprechende virtuelle kinematische Verzerrungsgröße $\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}$ auf der Mikroskala darstellbar sind. Zudem sind aus den mikroskalig formulierten Verzerrungen $\tilde{\varepsilon}_{kl}$ über die Verknüpfung zur Makroskala (Rel. 3-111) sowie mit den Definitionen (Rel. 3-35) der virtuellen kinematischen Größen der Makroskala, die eingeführten virtuellen kinematischen Verzerrungsgrößen $\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}$ durch den folgenden Ausdruck auf der Mikroskala darstellbar:

$$\delta \tilde{\varepsilon}_{kl} = \delta \varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} \cdot (\delta \eta_{ilk} + \delta \eta_{ikl}) \cdot \tilde{x}_i \quad (\text{Rel. 3-113})$$

In der Darstellung der volumenbezogenen virtuellen Arbeit auf der Mikroskala (Rel. 3-112) muss nun noch die zugeordnete konjugierte Spannung $\tilde{\sigma}_{ij}$ entsprechend berücksichtigt werden, da in diese Größe das auf der Mikroebene eingeführte Modell zur Versetzungsbewegungen nach Taylor (Rel. 3-75) eingebaut werden muss. Diese Darstellung erfolgt über die Einführung effektiver Verzerrungs- und Spannungsgrößen $\tilde{\varepsilon}_e$ bzw. $\tilde{\sigma}_e$ und durch die quadratischen 2. (von Mises) Invarianten der entsprechenden tensoriellen sowie deviatorischen Größen $\tilde{\varepsilon}_{ij}$ bzw. $\tilde{\sigma}'_{ij}$ bezüglich der Mikroskala:

$$\tilde{\varepsilon}_e^2 = \frac{2}{3} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \quad \tilde{\sigma}_e^2 = \frac{2}{3} \cdot \tilde{\sigma}'_{ij} \cdot \tilde{\sigma}'_{ij} \quad \tilde{\sigma}'_{ij} = \tilde{\sigma}_{ij} - \frac{1}{3} \cdot \tilde{\sigma}_{kk} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 3-114})$$

Aufgrund der Darstellung der Verzerrungen und deviatorischen Spannungen durch deren Invarianten bleibt die Größe der virtuellen Arbeit auf der Mikroskala unverändert, womit offensichtlich folgende Äquivalenz gegeben ist:

$$\delta \tilde{\mathcal{W}} = \tilde{\sigma}_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} = \tilde{\sigma}'_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} = \tilde{\sigma}_e \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_e \quad (\text{Rel. 3-115})$$

Führt man die 1. Variation der effektiven Verzerrungen bezüglich beliebiger kompatibler virtueller Verschiebungen $\delta \tilde{u}_i(\tilde{x}_p)$ durch, so erhält man den Ausdruck

$$\delta \tilde{\varepsilon}_e^2 = 2 \cdot \tilde{\varepsilon}_e \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_e \quad \delta \left(\frac{2}{3} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \right) = \frac{2}{3} \cdot (\delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} + \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij}) = 2 \cdot \frac{2}{3} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \quad (\text{Rel. 3-116})$$

$$\tilde{\varepsilon}_e \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_e = \frac{2}{3} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \cdot \tilde{\varepsilon}_{ij} \quad \delta \tilde{\varepsilon}_e = \frac{2}{3} \cdot \frac{\tilde{\varepsilon}_{ij}}{\tilde{\varepsilon}_e} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij}$$

wobei über die Substitution des Terms (Rel. 3-116) in die Äquivalenz der virtuellen Arbeit $\delta \tilde{\mathcal{W}}$ auf der Mikroskala (Rel. 3-115) die deviatorische tensorielle Spannung $\tilde{\sigma}'_{ij}$ durch deren 2. quadratische Invariante, also der zugeordneten effektiven (von Mises) Größe $\tilde{\sigma}_e$, mittels Koeffizientenvergleich bezüglich $\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}$ bestimmt werden kann:

$$\delta \tilde{\mathcal{W}} = \tilde{\sigma}_e \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_e = \tilde{\sigma}'_{ij} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} = \tilde{\sigma}_e \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{\tilde{\varepsilon}_{ij}}{\tilde{\varepsilon}_e} \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij} \Rightarrow \tilde{\sigma}'_{ij} = \tilde{\sigma}_e \cdot \frac{2}{3} \cdot \frac{\tilde{\varepsilon}_{ij}}{\tilde{\varepsilon}_e} \quad (\text{Rel. 3-117})$$

Diese auf der Mikroskala zentrale konstitutive Darstellung (Rel. 3-117) wird dazu verwendet um das Taylormodell (Rel. 3-75) in die Gesamtbeschreibung einzubauen, woraus letztendlich die mikromechanisch motivierte Spannungs-Dehnungsrelation folgt:

$$\tilde{\sigma}'_{ij} = \frac{2}{3} \cdot \frac{\tilde{\varepsilon}_{ij}}{\tilde{\varepsilon}_e} \cdot \hat{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_e) \quad \text{mit} \quad \tilde{\sigma}_e := \hat{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_e) = \tilde{\sigma} = \sigma_Y \cdot \sqrt{\hat{f}^2(\tilde{\varepsilon}_e) + l \cdot \eta_e} \quad (\text{Rel. 3-118})$$

Der Homogenisierungsansatz wird aus der Äquivalenz der absoluten virtuellen plastischen Arbeit $\delta\tilde{\mathcal{W}} = \delta\mathcal{W}$ abgeleitet, wobei die aus der Mesozelle resultierende mikroskalige Beschreibung der absoluten virtuellen Arbeit $\delta\tilde{\mathcal{W}}$

$$\tilde{\omega} = \frac{d\tilde{\mathcal{W}}}{d\tilde{V}} \quad \delta\tilde{\omega} = \frac{d\delta\tilde{\mathcal{W}}}{d\tilde{V}} \quad \delta\tilde{\mathcal{W}} = \int_{V_{cell}} \delta\tilde{\omega} d\tilde{V} = \int_{V_{cell}} \tilde{\sigma}'_{ij} \cdot \delta\tilde{\varepsilon}_{ij} d\tilde{V} = \delta\mathcal{W} \quad (\text{Rel. 3-119})$$

einem materiellen Punkt auf der Makroskala zugeordnet ist, dem wiederum diese Mesozelle angeheftet wird. Daraus lässt sich über die spezifische virtuelle Arbeit $\delta\omega$ (Rel. 3-36) die absolute virtuelle Arbeit $\delta\mathcal{W}$ über das Zellvolumen V_{cell} ermitteln:

$$\omega = \frac{d\mathcal{W}}{dV} \quad \delta\omega = \frac{d\delta\mathcal{W}}{dV} \quad \Rightarrow \quad \delta\mathcal{W} = (\sigma'_{ij} \cdot \delta\varepsilon_{ij} + \tau'_{ijk} \cdot \delta\eta_{ijk}) \cdot V_{cell} = \delta\tilde{\mathcal{W}} \quad (\text{Rel. 3-120})$$

Verwendet man die Beziehungen (Rel. 3-113) sowie (Rel. 3-119) bzw. (Rel. 3-120) und setzt diese in die Äquivalenz der absoluten virtuellen plastischen Arbeit $\delta\tilde{\mathcal{W}} = \delta\mathcal{W}$ ein, so resultiert folgende Bestimmungsgleichung:

$$\int_{V_{cell}} \tilde{\sigma}'_{ij} \cdot \left[\delta\varepsilon_{kl} + \frac{1}{2} \cdot (\delta\eta_{ilk} + \delta\eta_{ikl}) \cdot \tilde{x}_i \right] d\tilde{V} = (\sigma'_{ij} \cdot \delta\varepsilon_{ij} + \tau'_{ijk} \cdot \delta\eta_{ijk}) \cdot V_{cell} \quad (\text{Rel. 3-121})$$

Da die virtuellen kinematischen Größen $\delta\varepsilon_{ij}$ bzw. $\delta\eta_{ijk}$ unabhängig von den lokalen Mesozellkoordinaten und somit bezüglich des Integrationsprozesses als konstante Faktoren anzusehen sind, können mittels Koeffizientenvergleich bezüglich dieser Variationsgrößen $\delta\varepsilon_{ij}$ bzw. $\delta\eta_{ijk}$ die konstitutiven Bestimmungsgleichungen für die deviatorischen Spannungen von σ_{ij} bzw. τ_{ijk}

$$\sigma'_{ij} = \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} \tilde{\sigma}'_{ij} d\tilde{V} \quad \tau'_{ijk} = \frac{1}{V_{cell}} \cdot \left[\frac{1}{2} \cdot \int_{V_{cell}} (\tilde{\sigma}'_{jk} \cdot \tilde{x}_i + \tilde{\sigma}'_{ik} \cdot \tilde{x}_j) d\tilde{V} \right]' \quad (\text{Rel. 3-122})$$

auf der Makroskala hergeleitet werden. Wird noch die Mikro-Makro-Verknüpfungsbeziehung (Rel. 3-113) in die Bestimmungsgleichungen der deviatorischen Spannungen (Rel. 3-122) eingesetzt, so müssen nach aufwändiger Evaluation der mathematischen Terme folgende dominierende Integrale

$$\frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} d\tilde{V} = 1 \quad \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} x_k d\tilde{V} = 0 \quad \frac{1}{V_{cell}} \int_{V_{cell}} x_k \cdot x_l d\tilde{V} = \frac{1}{12} \cdot l_\varepsilon^2 \cdot \delta_{kl} \quad (\text{Rel. 3-123})$$

ausgewertet werden, um eine explizite Vorschrift der konstitutiven Beziehungen zu erhalten. Für die ebenfalls von den Koordinaten der Mesozelle abhängigen effektiven Verzerrungen (Rel. 3-114) und Taylorspannungen (Rel. 3-118) der Versetzungsbewegungen werden vereinfachende Annahmen getroffen, um die Integrale in den Bestimmungsgleichungen (Rel. 3-122) analytisch auswerten zu können und damit explizite Formeln für die Spannungen zu erhalten:

$$\sigma'_{ij} = \frac{2}{3} \cdot \frac{\varepsilon_{ij}}{\varepsilon_e} \cdot \hat{\sigma}(\varepsilon_e) \quad \tau'_{ijk} = l_\varepsilon^2 \cdot \left[\frac{\hat{\sigma}(\varepsilon_e)}{\varepsilon_e} \cdot (\Lambda_{ijk} - \Pi_{ijk}) + \frac{\sigma_Y^2 \cdot \hat{f}(\varepsilon_e) \cdot \frac{\partial \hat{f}(\varepsilon_e)}{\partial \varepsilon_e}}{\hat{\sigma}(\varepsilon_e)} \cdot \Pi_{ijk} \right] \quad (\text{Rel. 3-124})$$

In den Gleichungen (Rel. 3-124) der Makrospannungen stellt der Ausdruck

$$\hat{\sigma}(\varepsilon_e) = \sigma_Y \cdot \sqrt{\hat{f}^2(\varepsilon_e) + l \cdot \eta_e} \quad (\text{Rel. 3-125})$$

die Fließspannung dar, der Term Λ_{ijk} ist durch die Vorschrift

$$\Lambda_{ijk} = \frac{1}{72} \cdot \left[2 \cdot \eta_{ijk} + \eta_{kji} + \eta_{kij} - \frac{1}{4} \cdot (\delta_{ik} \cdot \eta_{ppj} + \delta_{jk} \cdot \eta_{ppi}) \right] \quad (\text{Rel. 3-126})$$

gegeben und Π_{ijk} wird durch

$$\Pi_{ijk} = \frac{\varepsilon_{mm}}{54 \cdot \varepsilon_e^2} \cdot \left[\varepsilon_{ik} \cdot \eta_{jmm} + \varepsilon_{jk} \cdot \eta_{imm} + \eta_{kij} - \frac{1}{4} \cdot (\delta_{ik} \cdot \varepsilon_{jp} + \delta_{jk} \cdot \varepsilon_{ip}) \cdot \eta_{pmm} \right] \quad (\text{Rel. 3-127})$$

determiniert. An dieser Stelle sei noch explizit darauf verwiesen, dass für die angegebenen Konstitutivgleichungen kein Potenzial existieren kann, um daraus in analoger Weise zur „Strain Gradient Theory“ die Spannungen durch partielle Ableitung nach den konjugierten Dehnungsgrößen darzustellen. Der Beweis dieser Aussage ist durch die folgende Ausführungen einfach nachzuvollziehen:

$$\sigma'_{ij} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad \tau'_{ijk} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \eta_{ijk}} \Rightarrow \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \eta_{lmn}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \eta_{lmn} \partial \varepsilon_{ij}} \quad \frac{\partial \tau'_{ijk}}{\partial \varepsilon_{lm}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \varepsilon_{lm} \partial \eta_{ijk}} \quad (\text{Rel. 3-128})$$

Durch vertauschen der Differentiationsreihenfolge und Umbenennen der Indizes kann die Nichtexistenz des Potentials einer freien inneren Energiedichte leicht nachgewiesen werden:

$$\frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \eta_{lmn}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \eta_{lmn} \partial \varepsilon_{ij}} \quad \frac{\partial \tau'_{lmn}}{\partial \varepsilon_{ij}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \eta_{lmn} \partial \varepsilon_{ij}} \Rightarrow \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \eta_{lmn}} = \frac{\tilde{w}(\varepsilon_{pq}, \eta_{rst})}{\partial \eta_{lmn} \partial \varepsilon_{ij}} \neq \frac{\partial \tau'_{lmn}}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (\text{Rel. 3-129})$$

Damit ist die „Mechanism based Strain Gradient Theory“ vollständig hergeleitet und dargestellt. Bemerkenswert an dieser Theorie ist sicherlich die Berücksichtigung der Mikrostruktur durch Versetzungsbewegungen, wobei dennoch relativ einfach handzuhabende Gleichungssätze resultieren, welche die plastischen Deformationsvorgänge ausreichend beschreiben.

Abschließend bleibt noch anzumerken, dass die Mesozelle einerseits groß genug sein muss um eine ausreichende Menge an Versetzungen zu beinhalten, andererseits aber auch klein genug sein muss um die lineare Approximation des Verzerrungsgradienten durch die Taylorreihenentwicklung (Rel. 3-108) bzw. (Rel. 3-111) sicherzustellen. D. h., die Größe der Mesozelle muss signifikant kleiner sein als die charakteristische intrinsische Länge l (Rel. 3-75), um dadurch die Versetzungsbewegungen die das Taylormodell beschreibt zu ermöglichen. Ein Vorschlag der als Kompromiss zwischen den divergierenden Forderungen angesehen werden kann ist durch den Ausdruck

$$l_\varepsilon = \beta \cdot L_{yield} = \beta \cdot \frac{\mu \cdot b}{\sigma_Y} \quad (\text{Rel. 3-130})$$

gegeben, wobei β einen empirischen – dem Material angepassten – freien Skalierungsparameter von ~ 1 bis ~ 10 und L_{yield} den mittleren Abstand zwischen statistisch verteilten Versetzungen darstellt.

4 Numerische Implementierung im Rahmen der Finiten Element Methode

Aus den Bilanz- bzw. Erhaltungsgleichungen und den anderen bisher beschriebenen Größen geht hervor, dass man es bei der Lösung von kontinuumsmechanischen Problemen im Wesentlichen mit gekoppelten partiellen Differentialgleichungssystemen zu tun hat. Analytische Lösungen dieser Systeme sind in der nichtlinearen Kontinuumsmechanik nur für wenige einfache (Anfangs-) Randwertprobleme möglich, weshalb man gezwungen ist Näherungslösungen mit Methoden aus der numerischen Mathematik zu bestimmen. Diese näherungsweise Berechnungen auf Basis von Variationsverfahren – wie beispielsweise die Methode der Finiten Elemente (kurz FEM) – eröffnen ein sehr breites Anwendungsspektrum.

Im Folgenden werden die Grundzüge der nichtlinearen Finite Element Methode (FEM) erläutert, wobei alle Prozesse als quasistatisch, d.h. unter Vernachlässigung der Massenträgheitsterme, und rein mechanisch, d.h. ohne thermomechanische Kopplung, betrachtet werden. Die Lösung von Deformationsproblemen kann in der Strukturmechanik durch zweierlei Ansätze berechnet werden, die jedoch auf dasselbe gekoppelte Gleichungssystem führen. Diese beiden Ansätze lauten,

- I. Prinzip der virtuellen Verschiebungen (Methode der gewichteten Residuen; bspw. Galerkin Verfahren) und
- II. Prinzip vom Minimum des Gesamtpotenzials (Variationsformulierung).

In den folgenden Abschnitten wird etwas genauer auf die zwei Möglichkeiten eingegangen.

4.1 Darstellung und Ansätze lokaler Theorien der Festkörpermechanik

Grundsätzlich ist die Finite Element Methode zur Lösung vieler Klassen von gekoppelten partiellen Differentialgleichungssystemen geeignet. Die Techniken und Formalismen zur Implementierung weisen für alle Arten von partiellen Differentialgleichungssystemen starke Ähnlichkeiten auf. Kommen jedoch erweiterte Terme höherer Ableitungsordnung im Gesamtsystem hinzu, werden die Ausdrücke, die zur Lösung abgeleitet bzw. in weiterer Folge auszuwerten sind, überaus komplex. Dieser Umstand gilt speziell bei Gradiententheorien höherer Ordnungen, welche in dieser Arbeit einen Schwerpunkt darstellen. Um einen Einblick in die Techniken zur Implementierung zu geben, werden in den folgenden Unterabschnitten ganz bewusst keine erweiterten Terme berücksichtigt, damit die Übersichtlichkeit der analytischen Rechenschritte nachvollziehbarer gegeben und transparenter dargestellt ist. Erst im Abschnitt 4.2 werden die Anteile höherer Ordnung mit demselben zuvor vorgestellten Konzept gesondert behandelt und die damit verbundenen Schwierigkeiten genauer betrachtet.

An dieser Stelle sei darauf verwiesen, dass sich die in den folgenden Unterabschnitten 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.3 dargestellten Ausführungen zur numerischen Implementierung auf nichtlineare, also finite, Verzerrungsgrößen beziehen, obwohl die in Abschnitt 3 dargelegten Beschreibungen mikrostrukturell motivierter Gradientenplastizitätsmodelle durch kleine, also infinite, Deformationsmaße formuliert worden sind. Dieser Umstand ist jedoch als unproblematisch anzusehen, da die aus der Theorie finiter Deformationen resultierenden Ausdrücke bzw. Gleichungen eine Verallgemeinerung darstellen, sowie in deren Form und Struktur zur Beschreibungen infiniter Verzerrungsmaße keine prinzipiellen Unterschiede aufweisen.

4.1.1 Schwache Formulierung der Erhaltungsgleichungen

Zur Berechnung von quasistatischen Randwertproblemen der Kontinuumsmechanik ist das gekoppelte System von Differentialgleichungen bestehend aus

- I. nichtlinearen kinematischen Verzerrungsbeziehung von (Rel. 2-13) $E_{ik} := \frac{1}{2} ((F_{il})^T \cdot F_{lk} - \delta_{ik})$,
- II. lokalen Form der Impulserhaltung von (Rel. 2-56) $\frac{\partial (F_{kl} S_{li})}{\partial X_k} + \rho_0 \cdot \tilde{b}_i = \rho_0 \cdot \frac{\partial v_i}{\partial t}$,
- III. Konstitutivgesetz von (Rel. 2-100) $S_{ij} := \hat{f}_{ij}(F_{kl}) = \tilde{f}_{ij}(C_{kl}) = \check{f}_{ij}(E_{kl})$,

hier in der Referenz- bzw. Ausgangskonfiguration notiert, zu lösen. Zusätzlich sind noch Randbedingungen für vorgegebene Verschiebungen und Spannungen

$$u_i = \hat{u}_i(X_k) = \bar{u}_i = \hat{\bar{u}}_i(X_k) \quad \forall (X_k \in \partial {}^u V \wedge t \geq 0) \quad {}^u V \cap {}^\sigma V = 0 \quad (\text{Rel. 4-1})$$

$$\hat{t}_i(X_k) = P_{ik} \cdot N_k = F_{ij} \cdot S_{jk} \cdot N_k = \hat{\bar{t}}_i(X_k) \quad \forall (X_k \in \partial {}^\sigma V \wedge t \geq 0)$$

und bei dynamischen Problemen die Anfangsbedingungen für Ausgangslage und Geschwindigkeit

$$u_i = \hat{u}_i(X_k) = {}^0\bar{u}_i = {}^0\hat{\bar{u}}_i(X_k) \quad \forall (X_k \in V \wedge t = 0) \quad (\text{Rel. 4-2})$$

$$v_i = \hat{v}_i(X_k) = \frac{\partial u_i}{\partial t} = {}^0\bar{v}_i = {}^0\hat{\bar{v}}_i(X_k) \quad \forall (X_k \in V \wedge t = 0)$$

zu erfüllen. Grundsätzlich kann dieses Gleichungssystem bezüglich beliebiger Konfigurationen (vgl. Abschnitte 2.1.1 und 2.1.3) formuliert werden. Um die in Abschnitt 3 mikromechanisch motivierten Modelle in dieses System zu integrieren, werden die allgemein gültigen Erhaltungsgleichungen bezüglich der Momentankonfiguration dargestellt. Zum besseren Verständnis wird hier zur Herleitung der schwachen Form der Impulsbilanz von dem eben dargestellten System bezüglich der Ausgangs- bzw. Referenzkonfiguration ausgegangen.

Das Prinzip der virtuellen Verschiebungen kann als eine aus der Impulsbilanz resultierende Formulierung angesehen werden, die auch als schwache Form der durch die Impulserhaltung gegebenen Differentialgleichung bezeichnet wird. Da in das Prinzip der virtuellen Verschiebungen keine weiteren Annahmen – wie z. B. die Existenz eines Potenzials zur Darstellung der resultierenden Spannungen – eingehen, ist dieses Arbeitsprinzip ganz allgemein anwendbar. So z. B. auch bei der Behandlung von inelastischen Materialverhalten oder aber auch bei reibungsbehafteten Kontaktproblemen, die im Wesentlichen nichtkonservative Problemklassen darstellen.

Die Herleitung des Prinzips der virtuellen Verschiebungen beginnt mit der lokalen Form der Impulsbilanz, die skalar mit einer vektorwertigen Funktion ξ_i – oft virtuelle Verschiebung oder Testfunktion genannt – multipliziert wird. Die Testfunktion ξ_i kann frei gewählt werden, muss jedoch hinreichend oft stetig differenzierbar sein und zudem die homogenen Verschiebungsrandbedingungen erfüllen:

$$\xi_i = \{\hat{\xi}_i(X_k) \mid \hat{\xi}_i(X_k) = 0_i \quad \forall (X_k \in \partial {}^u V \wedge t \geq 0)\} \quad (\text{Rel. 4-3})$$

Die anschließende, innerhalb der Referenzkonfiguration durchzuführende Integration über das Volumen des betrachteten Körpers und der Verwendung der Spannungstransformation (Rel. 2-40) ergibt

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial(F_{ki} \cdot S_{li})}{\partial X_k} \cdot \xi_i dV + \int_V \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dV &= 0 \\ \Rightarrow \int_V \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} \cdot \xi_i dV + \int_V \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dV &= 0 \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-4})$$

Durch partielle Integration des ersten Terms, der die inneren induzierten Belastungen widerspiegelt, und nachfolgender Auswertung des Divergenztheorems sowie der Einarbeitung der Spannungsrandbedingungen erhält man die schwache Form des Gleichgewichts:

$$G(u_m, \xi_n) := \int_V P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} dV - \int_V \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dV - \int_{\partial {}^\sigma V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA = 0 \quad (\text{Rel. 4-5})$$

In diesem Zusammenhang ist es zweckmäßig für den auf die Referenzkonfiguration bezogenen räumlichen Gradienten der vektoriellen Testfunktion eine doppelt indizierte Substitutionsgröße definierend einzuführen, aus der ein symmetrischer Anteil bestimmbar ist:

$$\xi_{\bar{X}} \nabla_{ik} := \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} \quad \xi_{\bar{X}} \nabla_{ik}^s = \frac{1}{2} \cdot \left(\xi_{\bar{X}} \nabla_{ik} + \xi_{\bar{X}} \nabla_{ki} \right) \quad (\text{Rel. 4-6})$$

Durch Einführung des verallgemeinerten Variationsoperators bezüglich mehrfach indizierter tensorieller Größen

$$\begin{aligned} \delta_{g_{k_1 k_2 k_3 \dots}} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots}) &:= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ [f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots})] \Big|_{x_{j_1 j_2 j_3 \dots} \mapsto x_{j_1 j_2 j_3 \dots} + \alpha \cdot g_{j_1 j_2 j_3 \dots}} \right\} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots} + \alpha \cdot g_{j_1 j_2 j_3 \dots}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-7})$$

sowie einer verkürzten Notation bei Verwendung der festgelegten Testfunktionen $\xi_j = \hat{\xi}_i(X_k)$

$$\delta f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_j) := \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_j + \alpha \cdot \xi_j) \quad (\text{Rel. 4-8})$$

kann die schwache Form der Impulserhaltungsgleichung (Rel. 4-5) durch weitere Umformungen schließlich in den Ausdruck

$$G(u_m, \xi_n) := \int_V S_{ki} \cdot \delta E_{ki} dV - \int_V \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA = 0 \quad (\text{Rel. 4-9})$$

umgewandelt werden, welcher sich hier auf die Referenzkonfiguration bezieht. Im physikalischen Sinne interpretiert, entspricht in (Rel. 4-9) der erste Term der virtuellen inneren Arbeit, wohingegen die beiden letzten Terme die virtuelle Arbeit der äußeren Belastungen und den Massenträgheitsterm beschreiben.

In Bezug auf (Rel. 4-5) wurden in (Rel. 4-9) durch Ausnutzung spezieller tensorieller Strukturen und Eigenschaften (bspw. Symmetrie, Antisymmetrie, etc.) der unsymmetrische 1. Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor P_{ki} in den symmetrischen 2. Piola-Kirchhoffsche Spannungstensor S_{ki} umgerechnet (vgl. Abschnitt 2.1.3), sowie die Darstellung der vektoriellen multiplikativen Verknüpfung mit den räumlichen Gradienten der Testfunktion $\partial \xi_i / \partial X_k$ durch eine äquivalente Beschreibung mit der 1. Variation des Green-Lagrangischen Verzerrungstensors E_{ki} überführt. Diese Eigenschaft soll im Folgenden nachvollziehbarer dargestellt werden und zudem die formale Anwendbarkeit der Notation des Variationsoperators verdeutlichen, welche in nachfolgenden Abschnitten in Bezug auf die erweiterten Theorien höherer Ordnung noch Verwendung finden wird. In kontinuumsmechanischen Problemen der Festkörpermechanik welche im Rahmen der FEM behandelt werden, ist es im Allgemeinen üblich, das Verschiebungsfeld u_i als unbekannte Größe und somit als unabhängige Variable festzulegen, wobei grundsätzlich auch andere Größen hierfür herangezogen werden könnten. Mit dieser Voraussetzung ist unmittelbar ersichtlich, dass sowohl die erste Variation des Verschiebungsgradienten (Rel. 2-12)

$$\begin{aligned} \delta H_{ik} &= \delta \hat{H}_{ik}(u_a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{H}_{ik}(u_j)] \Big|_{u_j \mapsto u_j + \alpha \cdot \xi_j} = \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_k} \right) \Big|_{u_i \mapsto u_i + \alpha \cdot \xi_i} \right] \Big|_{\alpha=0} \\ \delta H_{ik} &= \delta \hat{H}_{ik}(u_a) = \left[\frac{\partial}{\partial X_k} \frac{\partial (u_i + \alpha \cdot \xi_i)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} = {}^X \nabla_{ik} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-10})$$

als auch jene des Deformationsgradienten dem Gradient der vektoriellen Testfunktion (Rel. 4-6) entspricht.

$$\begin{aligned} \delta \hat{F}_{ik}(u_a) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{F}_{ik}(u_j)] \Big|_{u_j \mapsto u_j + \alpha \cdot \xi_j} = \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\delta_{ik} + \frac{\partial u_i}{\partial X_k} \right) \Big|_{u_i \mapsto u_i + \alpha \cdot \xi_i} \right] \Big|_{\alpha=0} \\ \delta \hat{F}_{ik}(u_a) &= \delta F_{ik} = \left[\frac{\partial}{\partial X_k} \frac{\partial (u_i + \alpha \cdot \xi_i)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} = {}^X \nabla_{ik} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-11})$$

Die erste Variation des symmetrischen Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors (Rel. 2-13), welche wieder symmetrisch sein muss, kann aufgrund seiner Darstellung bzw. inneren Struktur durch den Deformationsgradienten (Rel. 2-12) und dessen Variation (Rel. 4-11) ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \delta E_{jk} &:= \frac{1}{2} \cdot \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{F}_{jl}^T(u_i) \cdot \hat{F}_{lk}(u_i) - \delta_{jk}] \Big|_{u_i \mapsto u_i + \alpha \cdot \xi_i} \right\} \Big|_{\alpha=0} = \frac{1}{2} \cdot (\delta F_{jl}^T \cdot F_{lk} + F_{jl}^T \cdot \delta F_{lk}) \\ \delta E_{jk} &= \frac{1}{2} \cdot \left[\left(\frac{\partial \xi_j}{\partial X_l} \right)^T \cdot F_{lk} + F_{jl}^T \cdot \frac{\partial \xi_l}{\partial X_k} \right] = \frac{1}{2} \cdot \left[{}^X \nabla_{jl}^T \cdot F_{lk} + F_{jl}^T \cdot {}^X \nabla_{lk} \right] \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-12})$$

Der im Integranden der schwachen Form der Impulserhaltung (Rel. 4-5) enthaltene Anteil, welcher die inneren Reaktionen bzw. Spannungen auf die äußeren Belastungen darstellt, kann durch nachfolgenden Ausdruck reformuliert werden, wobei der unsymmetrische 1. Piola-Kirchhoffsche durch den symmetrischen 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (Rel. 2-40) substituierbar (vgl. Abschnitt 2.1.3) ist.

$$P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} = F_{il} \cdot S_{lk} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} = F_{il} \cdot S_{lk} \cdot {}^X \nabla_{ik} = S_{lk} \cdot \underbrace{F_{il}^T \cdot {}^X \nabla_{ik}}_{=: Q_{lk}} = S_{lk} \cdot Q_{lk} \quad (\text{Rel. 4-13})$$

Die aus dieser Umformung (Rel. 4-13) resultierende tensorielle Hilfsgröße Q_{lk} kann additiv in einen symmetrischen und antisymmetrischen Anteil zerlegen werden $Q_{lk} = Q_{lk}^s + Q_{lk}^A$, wobei ersichtlich ist,

dass der symmetrische Anteil von Q_{lk} der ersten Variation des Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors entspricht:

$$Q_{lk}^S = \frac{1}{2} \cdot \left(F_{lk}^T \cdot \xi \nabla_{ki} + \xi \nabla_{ik}^T \cdot F_{kl} \right) = \delta E_{lk} \quad Q_{lk}^A = \frac{1}{2} \cdot \left(F_{lk}^T \cdot \xi \nabla_{ki} - \xi \nabla_{ik}^T \cdot F_{kl} \right) \quad (\text{Rel. 4-14})$$

Nun ist jedes skalare Produkt zwischen beliebigen symmetrischen und antisymmetrischen Tensoren gleich Null, was durch folgende Umformung sowie Umbenennung der Indizes dargestellt ist:

$$\begin{aligned} Q_{lk}^A &= \frac{1}{2} \cdot (Q_{lk} - Q_{lk}^T) = \frac{1}{2} \cdot (Q_{lk} - Q_{kl}) \quad S_{lk} = S_{kl} \\ S_{lk} \cdot Q_{lk}^A &= \frac{1}{2} \cdot (S_{lk} \cdot Q_{lk} - S_{lk} \cdot Q_{kl}) = \frac{1}{2} \cdot (S_{lk} \cdot Q_{lk} - S_{kl} \cdot Q_{kl}) \\ S_{lk} \cdot Q_{lk}^A &= \frac{1}{2} \cdot (S_{ij} \cdot Q_{ij} - S_{ij} \cdot Q_{ij}) = 0 \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-15})$$

Damit ist gezeigt, dass die schwache Form der Impulserhaltung in der Darstellung durch den unsymmetrischen 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor (Rel. 4-5) in die Form (Rel. 4-9) durch den symmetrischen 2. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor überführbar ist:

$$\begin{aligned} P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} &= S_{lk} \cdot F_{li}^T \cdot \xi \nabla_{ik} = S_{lk} \cdot Q_{lk} = S_{lk} \cdot (Q_{lk}^S + Q_{lk}^A) = S_{lk} \cdot Q_{lk}^S + \underbrace{S_{lk} \cdot Q_{lk}^A}_0 \\ P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} &= S_{lk} \cdot Q_{lk}^S = S_{lk} \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(F_{lk}^T \cdot \xi \nabla_{ki} + \xi \nabla_{ik}^T \cdot F_{kl} \right) = S_{lk} \cdot \delta E_{lk} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-16})$$

Da bei der Darstellung von Konstitutivmodellen die Formulierung der Erhaltungsgrundgleichungen bezüglich der Momentankonfiguration von Vorteil sein kann, soll nun noch die schwache Form der Impulsbilanz in diese Beschreibung überführt werden. Der Bezug der schwachen Form auf die Momentankonfiguration geschieht durch rein geometrische Operationen, indem die Basisvektoren, entsprechend der in den vorangegangenen Abschnitten angegebenen Transformationen (vgl. Abschnitt 2.1.3), durch „push forward“ auf die Momentankonfiguration bezogen werden. Die Transformation des unsymmetrischen 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors P_{ij} auf den symmetrischen Cauchyschen Spannungstensor σ_{ij} wurde bereits in (Rel. 2-39) angegeben. Aus dieser Transformation ist ersichtlich, dass der 1. Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor P_{ij} aufgrund der einseitigen Multiplikation mit dem Deformationsgradienten ein sogenannter Zweifeldtensor ist, da dieser seine Basisvektoren in den zwei unterschiedlichen Konfigurationen besitzt. Mit Substitutionsdefinition (Rel. 4-6) und aus der Umformung

$$\begin{aligned} P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} &= P_{ik} \cdot \xi \nabla_{ik} = \det(F_{ab}) \cdot \sigma_{il} \cdot (F_{lk}^{-1})^T \cdot \xi \nabla_{ik} = J \cdot \xi \nabla_{ik} \cdot F_{kl}^{-1} \\ P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} &= J \cdot \sigma_{il} \cdot \xi \nabla_{il} \Leftrightarrow \xi \nabla_{ik} \cdot F_{kl}^{-1} = \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} \cdot F_{kl}^{-1} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} = \xi \nabla_{il} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-17})$$

welche hier nur stark gekürzt angegeben ist, sowie unter Verwendung der Massenerhaltung ($dv = J \cdot dV$), kann die schwache Form der Impulserhaltung auf die Momentankonfiguration bezogen werden:

$$g(u_m, \xi_n) := \int_v \sigma_{il} \cdot \xi \nabla_{il} dv - \int_v \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dv - \int_{\partial \sigma_v} \bar{t}_i \cdot \xi_i da = 0 \quad (\text{Rel. 4-18})$$

Mit Hilfe weiterer tensorieller Umformungen, die analog zu den bereits zuvor gezeigten sind und (Anti-)Symmetrieeigenschaften von multiplikativ verknüpften Tensoren ausnutzen, ist dann die räumliche Impulsbilanz in endgültiger Form darstellbar:

$$g(u_m, \xi_n) := \int_v \sigma_{il} \cdot \xi \nabla_{il} dv - \int_v \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dv - \int_{\partial \sigma_v} \bar{t}_i \cdot \xi_i da = 0 \quad (\text{Rel. 4-19})$$

Diese Beziehung entspricht formal der schwachen Form der geometrisch linearen Theorie infinitesimaler Verzerrungsgrößen, auf welche sich auch die Ausführungen im Abschnitt 3 über mikromechanisch motivierte Konstitutivgesetze beziehen. Es ist allerdings zu beachten, dass sowohl der Integrationsbereich als auch die Spannungs- und virtuellen Verzerrungsgrößen hier in der verformungsabhängigen Momentankonfiguration auszuwerten sind, wodurch die Gleichung einen nichtlinearen Charakter erhält.

Ersetzt man die nichtlinearen Verzerrungsgrößen finiter Deformationen durch deren infinitesimale Linearisierung, fallen Momentan- und Referenzkonfiguration zusammen, wodurch der Integrationsbe-

reich und alle anderen durch die Ortskoordinaten ausgedrückten Größen ebenfalls linearen Charakter annehmen. Diese Tatsache wird in den Ausführungen zur numerischen Implementierung nichtlokaler Theorien Verwendung finden, um die Darstellung der Besonderheiten im Rahmen dieser Problemklassen nachvollziehbarer und übersichtlicher zu gestalten.

4.1.2 Variationsformulierung struktureller Probleme

Eine andere Möglichkeit die Bestimmungsgleichung zur Ermittlung der Feldgrößen herzuleiten, ist das Prinzip vom Minimum des elastischen Gesamtpotenzials, das allerdings die Existenz eines solchen für das zu behandelnde Problem voraussetzt. Solche Potenziale existieren nicht für alle Problemklassen der Kontinuumsmechanik. Für hyperelastisches Materialverhalten existiert jedoch eine freie innere spezifische Energiedichtefunktion W – oft als Verzerrungsenergiefunktion bezeichnet – welche die in einem Körper reversibel gespeicherte Energie beschreibt und somit ein Potenzial darstellt. Dieser Ansatz wurde bereits mehrfach zur Darstellung von diversen Spannungstensoren im Abschnitt 3 verwendet. Analog lässt sich der Spannungstensor S_{ij} über das eingeführte Potenzial W und die konjugierten Verzerungsgrößen C_{ij} (Rel. 2-8) und E_{ij} (Rel. 2-13) für Hyperelastizität darstellen.

$$W := \tilde{W}(C_{ab}) = \tilde{W}(E_{ab}) \quad S_{ij} = 2 \cdot \frac{\partial \tilde{W}(C_{ab})}{\partial C_{ij}} = 2 \cdot \frac{\partial \tilde{W}(E_{ab})}{\partial E_{kl}} \cdot \frac{\partial E_{kl}}{\partial C_{ij}} = 2 \cdot \frac{\partial \tilde{W}(E_{ab})}{\partial E_{kl}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \delta_{kl} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 4-20})$$

Mit dieser Größe W lässt sich das klassische Prinzip vom Minimum des elastischen Gesamtpotenzials formulieren, wenn zusätzlich noch die potenzielle Energie der eingepprägten äußeren Lasten berücksichtigt wird. Hierbei wird angenommen, dass die eingepprägten Lasten konservativ sind. Für statische Probleme erhält man

$$\Pi(u_m) := \int_V [\tilde{W}(C_{ab}) - \rho_0 \cdot \tilde{b}_i \cdot u_i] dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot u_i dA \Rightarrow \min \quad (\text{Rel. 4-21})$$

Von allen möglichen Deformationen erfüllen diejenigen das Gleichgewicht, die das Potenzial Π zum Minimum machen. Das Minimum kann aus der Variation berechnet werden, welche als Operator schon im Abschnitt 4.1.1 eingeführt wurde und im Wesentlichen eine Richtungsableitung darstellt:

$$\begin{aligned} \delta \Pi(u_m) &:= \delta \left[\int_V [\tilde{W}(C_{ab}(u_i)) - \rho_0 \cdot \tilde{b}_i \cdot u_i] dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot u_i dA \right] = \\ &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\int_V [\tilde{W}(C_{ab}(u_i + \alpha \cdot \xi_i)) - \rho_0 \cdot \tilde{b}_i \cdot (u_i + \alpha \cdot \xi_i)] dV + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot (u_i + \alpha \cdot \xi_i) dA \right] \right\} \Big|_{\alpha=0} = 0 \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-22})$$

Durch Auswertung der zu differenzierenden Terme erhält man mit (Rel. 2-8) und (Rel. 2-12)

$$\delta \Pi = \int_V \left[\frac{\partial W}{\partial C_{kl}} \cdot \frac{\partial C_{kl}}{\partial F_{mn}} \cdot \frac{\partial F_{mn}(u_i + \alpha \cdot \xi_i)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha=0} - \rho_0 \cdot \tilde{b}_i \cdot \xi_i \Big] dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA \quad (\text{Rel. 4-23})$$

worin leicht zu erkennen ist, dass aus vorigen Ausführungen die Beziehungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{mn}(u_i + \alpha \cdot \xi_i)}{\partial \alpha} &= \frac{\partial \xi_m}{\partial x_n} = \xi_X \nabla_{mn} = \delta F_{mn} \\ \frac{\partial C_{kl}}{\partial F_{mn}} &= \frac{\partial}{\partial F_{mn}} (C_{kl} - \delta_{kl}) = 2 \cdot \frac{\partial}{\partial F_{mn}} \frac{1}{2} \cdot (C_{kl} - \delta_{kl}) = 2 \cdot \frac{\partial E_{kl}}{\partial F_{mn}} \\ \Rightarrow \frac{\partial W}{\partial C_{kl}} \cdot \frac{\partial C_{kl}}{\partial F_{mn}} \cdot \frac{\partial F_{mn}(u_i + \alpha \cdot \xi_i)}{\partial \alpha} &= \underbrace{\frac{\partial W}{\partial C_{kl}} \cdot 2}_{S_{kl}} \cdot \underbrace{\frac{\partial E_{kl}}{\partial F_{mn}} \cdot \delta F_{mn}}_{\delta E_{kl}} = S_{kl} \cdot \delta E_{kl} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-24})$$

gelten und somit die bereits bekannte schwache Form der Impulserhaltung (Rel. 4-9) ohne Massenträgheitsterm bezüglich der Ausgangskonfiguration folgt:

$$\delta \Pi = \int_V [S_{kl} \cdot \delta E_{kl} - \rho_0 \cdot \tilde{b}_i \cdot \xi_i] dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA \quad (\text{Rel. 4-25})$$

Die Konstruktion eines Minimalprinzips ist aus mehreren Gründen von Bedeutung. Es ermöglicht beispielsweise die mathematische Untersuchung der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen und erlaubt

die Entwicklung von effizienten Algorithmen auf der Basis von Optimierungsverfahren. Das ist auch der Grund warum beispielsweise bei der Beschreibung von Kontaktproblemen gerne mit nichtkonservativen Potenzialansätzen gearbeitet wird.

4.1.3 Linearisierung der schwachen Form, Materialtangente

Aus der Nichtlinearität der Probleme in der kontinuumsmechanischen Beschreibungsweise folgt, dass das Gleichungssystem, welches beim Übergang in die diskrete Form entsteht, auch einen nichtlinearen Charakter hat. Da in dieser Arbeit hauptsächlich nichtlineare Problemklassen Anwendung finden, sollen nun die wesentlichen Schritte der numerischen Umsetzung etwas genauer dargestellt werden. Zu Beginn wird zunächst auf die wesentlichen mathematischen Zusammenhänge eingegangen.

Die inkrementelle Form der Taylorreihenentwicklung einer tensoriellen zweifach indizierten Größe f_{ij} , die als Funktion eines Tensors 1. Stufe x_k dargestellt und durch eine beliebige Abweichung u_k verändert wird, ist durch folgende Beziehung gegeben:

$$\begin{aligned} f_{ij}(^0x_k + u_k) &= f_{ij}(^0x_k) + \left. \frac{\partial f_{ij}(x_k)}{\partial x_{l_1}} \right|_{x_k = ^0x_k} \cdot u_{l_1} + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 f_{ij}(x_k)}{\partial x_{l_1} \partial x_{l_2}} \right|_{x_k = ^0x_k} \cdot u_{l_1} \cdot u_{l_2} + \dots \\ &\dots + \frac{1}{n!} \cdot \left. \frac{\partial^n f_{ij}(x_k)}{\partial x_{l_1} \partial x_{l_2} \dots \partial x_{l_{n-1}} \partial x_{l_n}} \right|_{x_k = ^0x_k} \cdot \prod_{a=1}^n u_{l_a} + \dots \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-26})$$

Dabei wird von ausreichenden Differenzierbarkeitseigenschaften bezüglich der zu entwickelnden tensorwertigen Funktion $f_{ij}(x_k)$ um den Entwicklungspunkt 0x_k ausgegangen. Nichtlineare Probleme werden meist durch den Ansatz der Linearisierung numerisch iterativ gelöst, die sich aus der Taylorreihendarstellung (Rel. 4-26) ergibt. In diesem Zusammenhang ist es zweckmäßig – resultierend aus dem linearen Anteil der Taylorreihe – einen linearen Operator einzuführen, der die Richtungsableitung einer tensoriellen Größe $f_{ij}(x_k)$ beschreibt:

$$\begin{aligned} \Delta_{d_k} f_{ij}(x_k) &:= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\{ [f_{ij}(\hat{x}_k)] \Big|_{\hat{x}_k \rightarrow x_k + \epsilon \cdot d_k} \right\} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \epsilon} [f_{ij}(\hat{x}_k)] \Big|_{\hat{x}_k \rightarrow x_k + \epsilon \cdot d_k} \right\} \Big|_{\epsilon=0} = \\ &= \left[\frac{\partial f_{ij}(\hat{x}_k)}{\partial \hat{x}_k} \cdot \frac{\partial \hat{x}_k}{\partial \epsilon} \right] \Big|_{\epsilon=0} = \left[\frac{\partial f_{ij}(x_k)}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial (x_k + \epsilon \cdot d_k)}{\partial \epsilon} \right] \Big|_{\epsilon=0} = \frac{\partial f_{ij}(x_k)}{\partial x_k} \cdot d_k \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-27})$$

Durch diesen Linearisierungsoperator kann die Taylorreihe wie folgt geschrieben bzw. reformuliert

$$f_{ij}(^0x_k + u_k) = f_{ij}(^0x_k) + \Delta_{u_k} f_{ij}(x_k) \Big|_{x_k = ^0x_k} + \dots \quad (\text{Rel. 4-28})$$

und die Linearisierung L_{ij} definiert werden, welcher hier der Vollständigkeit halber angeführt sei:

$$L_{ij}[f_{ab}(x_k), u_l] \Big|_{x_k = ^0x_k} = f_{ij}(^0x_k) + \Delta_{u_k} f_{ij}(x_k) \Big|_{x_k = ^0x_k} \quad (\text{Rel. 4-29})$$

Hieraus ist auch ersichtlich, dass die Problemklassen, welche sich durch ein Potenzial beschreiben lassen, stets symmetrische Koeffizientenmatrizen im diskreten und linearisierten System ergeben müssen, da sowohl der Variationsoperator (Rel. 4-7) bzw. (Rel. 4-8) als auch der Linearisierungsoperator (Rel. 4-30) formal identisch sind. Sie stellen beide – rein formal betrachtet – eine Richtungsableitung dar. An dieser Stelle ist es in Analogie zum generalisierten Variationsoperator (Rel. 4-7) zweckmäßig, die Definition des Linearisierungsoperator (Rel. 4-27) in ähnlicher Weise bezüglich mehrfach indizierter tensorwertiger Funktionen und Funktionsargumente zu verallgemeinern:

$$\begin{aligned} \Delta_{d_{k_1 k_2 k_3 \dots}} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots}) &:= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ [f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots})] \Big|_{x_{j_1 j_2 j_3 \dots} \rightarrow x_{j_1 j_2 j_3 \dots} + \alpha \cdot d_{j_1 j_2 j_3 \dots}} \right\} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_{j_1 j_2 j_3 \dots} + \alpha \cdot d_{j_1 j_2 j_3 \dots}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-30})$$

Da in der kontinuumsmechanischen Festkörpermechanik das unbekannte Verschiebungsfeld u_k formal als unabhängige Variable bezüglich der Linearisierungsoperationen anzusehen ist, stellt die folgende Notation

$$\begin{aligned}\Delta f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_k) &:= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ [f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_k)] \Big|_{x_k \mapsto x_k + \alpha \cdot \Delta u_k} \right\} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} f_{i_1 i_2 i_3 \dots}(x_k + \alpha \cdot \Delta u_k)\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-31})$$

eine zweckmäßige verkürzte Schreibweise dar.

Ausgehend von der auf die Ausgangskonfiguration bezogenen schwachen Form (Rel. 4-5) des Anfangs-randrandwertproblems

$$\begin{aligned}G(u_m, \xi_n) &:= \int_V P_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_i}{\partial X_k} dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA = 0 \\ G(u_m, \xi_n) &:= \int_V F_{il} \cdot S_{lk} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA = 0\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-32})$$

in der die Beschleunigungsterme und Volumenkräfte vernachlässigt sind, kann durch Linearisierung der Taylorreihenentwicklung

$$\begin{aligned}L[G(u_m, \xi_n), u_l] \Big|_{u_n = {}^0 u_n} &= G({}^0 u_m, \xi_n) + \Delta G(u_m, \xi_n) \Big|_{u_n = {}^0 u_n} = 0 \\ \Delta G(u_m, \xi_n) &= \Delta \left[\int_V F_{il} \cdot S_{lk} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA \right]\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-33})$$

und weitere physikalische Annahmen (Randlasten sind unabhängig von den Verschiebungen),

$$\begin{aligned}\Delta G(u_m, \xi_n) &= \Delta \int_V F_{il} \cdot S_{lk} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV - \underbrace{\Delta \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA}_{=0} \\ \Delta G(u_m, \xi_n) &= \Delta \int_V F_{il} \cdot S_{lk} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-34})$$

gekoppelt mit folgender Auswertung

$$\begin{aligned}\Delta G(u_m, \xi_n) &= \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\int_V \hat{F}_{il}(u_j) \cdot \hat{S}_{lk}(u_j) \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV \right] \Big|_{u_j \mapsto u_j + \alpha \cdot \Delta u_j} \right\} \Big|_{\alpha=0} \\ \Delta G(u_m, \xi_n) &= \int_V \frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \cdot \hat{S}_{lk}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)] \Big|_{\alpha=0} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-35})$$

der lineare Anteil, aus dem die Koeffizienten des zu lösenden Gleichungssystems resultieren, dargestellt werden:

$$\begin{aligned}\Delta G(u_m, \xi_n) &= \int_V \left[\frac{\partial \hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)}{\partial \alpha} \cdot \hat{S}_{lk}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) + \right. \\ &\quad \left. + \hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} \cdot \frac{\xi}{X} \nabla_{ik} dV\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-36})$$

Dieser linearisierte Anteil (Rel. 4-36) besteht aus zwei Anteilen, wobei der Erste die Einflüsse aus der Kinematik finiter Deformationen und der Zweite die Materialsteifigkeit, verknüpft mit der nichtlinearen Kinematik der Verzerrungsgrößen, repräsentieren. Um beide Anteile auszuwerten ist die Linearisierung des Deformationsgradienten (Rel. 2-12)

$$\begin{aligned}\Delta F_{il} = \Delta \hat{F}_{il}(u_j) &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\hat{F}_{il}(u_j) \Big|_{u_j \mapsto u_j + \alpha \cdot \Delta u_j} \right] \Big|_{\alpha=0} = \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\delta_{il} + \frac{\partial(u_i + \alpha \cdot \Delta u_i)}{\partial X_l} \right) \right] \Big|_{\alpha=0} \\ \Delta F_{il} = \Delta \hat{F}_{il}(u_j) &= \left[\frac{\partial}{\partial X_l} \frac{\partial(u_i + \alpha \cdot \Delta u_i)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \frac{\partial \Delta u_i}{\partial X_l} = \frac{\Delta u}{X} \nabla_{il}\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-37})$$

sowie die partielle Ableitungen von Verzerrungsgrößen wie (Rel. 2-13) zu bestimmen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{mn}}{\partial F_{rs}} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial F_{rs}} (F_{ml}^T \cdot F_{ln} - \delta_{ik}) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial F_{lm}}{\partial F_{rs}} \cdot F_{ln} + F_{lm} \cdot \frac{\partial F_{ln}}{\partial F_{rs}} \right) \\ \frac{\partial E_{mn}}{\partial F_{rs}} &= \frac{1}{2} \cdot (\delta_{lr} \cdot \delta_{ms} \cdot F_{ln} + F_{lm} \cdot \delta_{lr} \cdot \delta_{ns}) = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{ms} \cdot F_{rn} + \delta_{ns} \cdot F_{rm})\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-38})$$

Damit ist der für die Linearisierung resultierende Anteil aus den finiten Deformationen durch den Ausdruck

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial \hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)}{\partial \alpha} \cdot \hat{S}_{lk}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \right] \Big|_{\alpha=0} = \Delta F_{il} \cdot \hat{S}_{lk}(u_j) = \\ & = \frac{\partial \Delta u_i}{\partial X_l} \cdot \hat{S}_{lk}(u_j) = \frac{\partial \Delta u_i}{\partial X_l} \cdot \hat{S}_{lk} \left(\hat{E}_{ab} \left(\hat{F}_{pq}(u_j) \right) \right) = \frac{\partial \Delta u_i}{\partial X_l} \cdot \hat{S}_{lk}(E_{ab}) = \Delta_X^u \nabla_{il} \cdot \hat{S}_{lk}(E_{ab}) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-39})$$

und die Materialsteifigkeit mit den verknüpften Nichtlinearitäten der Verzerrungen mit dem Term

$$\begin{aligned} & \left[\hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \\ & = \left[\hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(\hat{E}_{ab}(\hat{F}_{pq}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)))}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \\ & = \left[\hat{F}_{il}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j) \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(E_{ab})}{\partial E_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{E}_{mn}(F_{pq})}{\partial F_{rs}} \cdot \frac{\partial F_{rs}(u_j + \alpha \cdot \Delta u_j)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \\ & = \hat{F}_{il}(u_j) \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(E_{ab})}{\partial E_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{E}_{mn}(F_{pq})}{\partial F_{rs}} \cdot \Delta F_{rs} = F_{il} \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(E_{ab})}{\partial E_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{E}_{mn}(F_{pq})}{\partial F_{rs}} \cdot \Delta_X^u \nabla_{rs} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-40})$$

gegeben, wobei die Materialtangente $\hat{A}_{lkmn}(E_{ab})$ wie folgt eingeführt wird:

$$\begin{aligned} & F_{il} \cdot \frac{\partial \hat{S}_{lk}(E_{ab})}{\partial E_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{E}_{mn}(F_{pq})}{\partial F_{rs}} \cdot \Delta_X^u \nabla_{rs} = \\ & = \frac{1}{2} \cdot F_{il} \cdot \hat{A}_{lkmn}(E_{ab}) \cdot (\delta_{ms} \cdot F_{rn} - \delta_{ns} \cdot F_{rm}) \cdot \Delta_X^u \nabla_{rs} \end{aligned} \quad \text{mit } \hat{A}_{lkmn}(E_{ab}) := \frac{\partial \hat{S}_{lk}(E_{ab})}{\partial E_{mn}} \quad (\text{Rel. 4-41})$$

Dieser, sich auf die Ausgangskonfiguration beziehende Tangentenmodul $\hat{A}_{lkmn}(E_{ab})$ stellt in der Standardtheorie einen Tensor 4. Stufe dar. Er ist aus programmtechnischer Sicht bei der Umsetzung und Implementierung eines Materialmodells in ein FEM System der aufwendigste Teil. Es ist von Vorteil die Programmsequenz, welche Materialeigenschaften und somit auch die Materialtangente berechnet, als eigenständiges Modul zu implementieren, das von der Elementroutine entkoppelt ist und von dieser aufgerufen werden kann. So besteht die Möglichkeit, mit demselben Element unterschiedliche Materialeigenschaften zu simulieren. Die Elementroutine selbst, beinhaltet im Wesentlichen das zu beschreibende partielle Differentialgleichungssystem, die nichtlineare Kinematik und den durchzuführenden Integrationsprozess.

4.1.4 Anmerkungen zur Theorie infinitesimaler Deformationen

Abschließend wird auf den Spezialfall kleiner (infinitesimaler) Deformationen eingegangen, der in den zuvor angeführten Darstellungen bereits enthalten ist. Der Fall infinitesimaler (kleiner) Deformation wird durch folgende Eigenschaften definiert (vgl. Abschnitt 2.1.1)

$$\|H_{ij}\| \ll 1 \Rightarrow F_{ij} = \delta_{ij} \quad x_i = X_i \quad E_{ij} = \frac{1}{2} \cdot (H_{ij} + H_{ji}) = \varepsilon_{ij} \quad S_{ij} = P_{ij} = \sigma_{ij} \quad (\text{Rel. 4-42})$$

welche zur Folge haben, dass Referenz- und Momentankonfiguration zusammenfallen. Damit können die kinematischen Verzerrungs- und konjugierten Spannungsgrößen in der schwachen Form der Impulserhaltung finiter Deformationen (Rel. 4-9) durch den infinitesimalen Verzerrungstensor ε_{ki} sowie dem Cauchyschen Spannungstensor σ_{ki} ersetzt werden, woraus folgender Ausdruck

$$G(u_m, \xi_n) := \int_V \sigma_{ki} \cdot \delta \varepsilon_{ki} dV - \int_V \rho_0 \cdot \left(\tilde{b}_i - \frac{\partial v_i}{\partial t} \right) \cdot \xi_i dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA = 0 \quad (\text{Rel. 4-43})$$

resultiert. Die erste Variation des Deformationstensors $\delta \varepsilon_{ki}$ ist mit (Rel. 2-14) und (Rel. 4-10) sowie (Rel. 4-6) durch die Terme

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot (\delta H_{ij} + \delta H_{ji}) = \delta H_{ij}^s \Rightarrow \delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{2} \cdot \left(\xi_X \nabla_{ij} + \xi_X \nabla_{ji} \right) = \xi_X \nabla_{ij}^s \quad (\text{Rel. 4-44})$$

reformulierbar. Die Linearisierung der schwachen Form der Impulsbilanz (Rel. 4-43) kann unter der Zuhilfenahme der bereits eingeführten Definitionen und Vereinfachungen, d.h. keine Berücksichtigung der Volumenkräftedichte ($\tilde{b}_i = 0_i$) und Massenträgheitskräfte ($\partial v_i / \partial t = 0_i$), analog zum Vorgehen im letzten Abschnitt erfolgen. Zudem macht wegen der infinitesimalen Deformationen die Berücksichtigung deformationsabhängiger Lasten keinen Sinn, weshalb diese Anteile ebenfalls als konstante Größen in Bezug auf die gesuchte unabhängige Variable des Verschiebungsfeldes $\bar{t}_i \neq \bar{t}_i(u_k)$ anzusehen sind. Un-

ter diesen Voraussetzungen folgt die nach dem 2. Glied abgebrochene Form der Taylorreihenentwicklung

$$L[G(u_m, \xi_n), u_l]|_{u_n = {}^0u_n} = G({}^0u_m, \xi_n) + \Delta G(u_m, \xi_n)|_{u_n = {}^0u_n} = 0$$

$$\Delta G(u_m, \xi_n) = \Delta \left[\int_V \sigma_{ki} \cdot \xi \nabla_{ki}^s dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA \right] \quad (\text{Rel. 4-45})$$

mit dem linearen Anteil

$$\Delta G(u_m, \xi_n) := \Delta \left(\int_V \sigma_{ki} \cdot \delta \varepsilon_{ki} dV - \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA \right)$$

$$\Delta G(u_m, \xi_n) = \Delta \int_V \sigma_{ki} \cdot \xi \nabla_{ki}^s dV - \underbrace{\Delta \int_{\partial \sigma_V} \bar{t}_i \cdot \xi_i dA}_{=0} = \Delta \int_V \sigma_{ki} \cdot \xi \nabla_{ki}^s dV \quad (\text{Rel. 4-46})$$

aus dem die Koeffizienten des zu lösenden Gleichungssystems resultieren. Da der Linearisierungsoperator eine Richtungsableitung darstellt, der im Kontext tensorieller Größen im Wesentlichen eine Differentiation nach einem skalaren Parameter beinhaltet, gelten für dessen Anwendung die Regeln der Differentialrechnung mehrerer veränderlicher Variablen. Bei der Anwendung des Linearisierungsoperators kann daher in den nachfolgenden Berechnungen auf die detaillierte definitionsgemäße Auswertung dieses Operators verzichtet werden, weshalb dann nur mehr die Regeln der Differentialrechnung mehrerer veränderlicher Variablen anzuwenden sind.

Unter diesen Annahmen kann der linearisierte Anteil aus der schwachen Form bezüglich infinitesimaler Deformationen ausgewertet werden:

$$\Delta G(u_m, \xi_n) = \int_V \Delta \sigma_{ki} \cdot \xi \nabla_{ki}^s dV = \int_V \frac{\partial \hat{\sigma}_{ki}(\varepsilon_{ab})}{\partial \varepsilon_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{\varepsilon}_{mn}(H_{pq})}{\partial H_{rs}} \cdot \Delta H_{rs} \cdot \xi \nabla_{ki}^s dV \quad (\text{Rel. 4-47})$$

Aus (Rel. 4-47) muss noch die Linearisierung des Verschiebungsgradienten (Rel. 2-12), vgl. (Rel. 4-37),

$$\Delta H_{rs} = \Delta \hat{H}_{rs}(u_j) = \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\hat{H}_{rs}(u_j) \Big|_{u_j \mapsto u_j + \alpha \Delta u_j} \right] \Big|_{\alpha=0} = \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{\partial(u_r + \alpha \Delta u_r)}{\partial X_s} \right) \right] \Big|_{\alpha=0}$$

$$\Delta H_{rs} = \Delta \hat{H}_{rs}(u_j) = \left[\frac{\partial}{\partial X_s} \frac{\partial(u_r + \alpha \Delta u_r)}{\partial \alpha} \right] \Big|_{\alpha=0} = \frac{\partial \Delta u_r}{\partial X_s} = \Delta u \nabla_{rs} \quad (\text{Rel. 4-48})$$

sowie die partielle Ableitung des infiniten Verzerrungstensors nach dem Verschiebungsgradienten

$$\frac{\partial \varepsilon_{mn}}{\partial H_{rs}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial H_{rs}} (H_{mn} + H_{nm}) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial H_{mn}}{\partial H_{rs}} + \frac{\partial H_{nm}}{\partial H_{rs}} \right) = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{mr} \cdot \delta_{ns} + \delta_{nr} \cdot \delta_{ms}) \quad (\text{Rel. 4-49})$$

berechnet werden. Mit Hilfe dieser Größen kann die Materialtangente \hat{D}_{kimn} aus dem Integranden der linearisierten schwachen Form der Impulsbilanz (Rel. 4-47) eingeführt werden:

$$\frac{\partial \hat{\sigma}_{ki}(\varepsilon_{ab})}{\partial \varepsilon_{mn}} \cdot \frac{\partial \hat{\varepsilon}_{mn}(H_{pq})}{\partial H_{rs}} \cdot \Delta H_{rs} =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial \hat{\sigma}_{ki}(\varepsilon_{ab})}{\partial \varepsilon_{mn}} \cdot (\delta_{mr} \cdot \delta_{ns} + \delta_{nr} \cdot \delta_{ms}) \cdot \Delta H_{rs} \quad \text{mit} \quad \hat{D}_{kimn}(\varepsilon_{ab}) := \frac{\partial \hat{\sigma}_{ki}(\varepsilon_{ab})}{\partial \varepsilon_{mn}} \quad (\text{Rel. 4-50})$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \hat{D}_{kimn}(\varepsilon_{ab}) \cdot (\delta_{mr} \cdot \delta_{ns} + \delta_{nr} \cdot \delta_{ms}) \cdot \Delta H_{rs}$$

Daraus ist ersichtlich, dass es sich bei der infinitesimalen Beschreibung um einen rein linearen Ausdruck handelt, welcher im Gegensatz zur Theorie finiter Deformationen (Rel. 4-41) zudem nicht aus zwei (Rel. 4-36) (Rel. 4-39), sondern nur aus einem Anteil besteht. Für komplexe Theorien höherer Ordnung wird deshalb in dieser Arbeit von einer Beschreibung im Rahmen finiter Deformationen abgesehen.

Abschließend sei darauf hingewiesen, dass sich die Linearisierung des Cauchyschen Spannungstensors $\Delta \sigma_{ki}$ auch durch die Linearisierung des infinitesimalen Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors $\Delta \varepsilon_{mn}$ ausdrücken lässt, anstatt den Verschiebungsgradienten ΔH_{rs} hierfür zu verwenden. Diese Eigenschaft kann durch die folgende Auswertung des Ausdrucks

$$\Delta \sigma_{ki} = \frac{\partial \hat{\sigma}_{ki}(\varepsilon_{ab})}{\partial \varepsilon_{mn}} \cdot \Delta \varepsilon_{mn} = D_{kimn} \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn}(H_{pq}) = D_{kimn} \cdot \frac{\partial \hat{\varepsilon}_{mn}(H_{pq})}{\partial H_{rs}} \cdot \Delta H_{rs}$$

$$\Delta \varepsilon_{mn} = \frac{\partial \hat{\varepsilon}_{mn}(H_{pq})}{\partial H_{rs}} \cdot \Delta H_{rs} = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{mr} \cdot \delta_{sn} + \delta_{nr} \cdot \delta_{sm}) \cdot \Delta H_{rs} = \frac{1}{2} \cdot (\Delta H_{mn} + \Delta H_{nm}) \quad (\text{Rel. 4-51})$$

gezeigt werden, der wiederum aus dem elementaren Koeffizientevergleich resultiert.

4.2 Spezielle Aspekte nichtlokaler Theorien

Um die bereits erwähnte Komplexität der zur FEM Implementierung notwendigen Linearisierung von Ausdrücken höherer Ordnung (hier Spannungstensor τ_{ijk}) in Grenzen zu halten und da zudem die gesamte Darstellung der mikrostrukturell motivierten nichtlinearen Konstitutivgleichungen (siehe Abschnitt 3.3) durch infinitesimale kinematische Verzerrungsgrößen ausgedrückt ist, wird in den nachfolgenden Ausführungen die Nichtlinearität der Deformationskinematik nicht berücksichtigt.

4.2.1 Darstellung der schwachen Form und Variationsauswertung

Da die Impulsbilanzgleichung (Rel. 3-57) Terme höherer Ordnung (τ_{ijk}) mit den üblicherweise vorhandenen Standardgrößen (σ_{ij}) in additiver Form verbindet, können die Anteile aus der Standardtheorie, welche durch den Cauchyschen Spannungstensor determiniert sind, und jene aus der erweiterten Theorie, die den Spannungstensor höherer Ordnung enthalten, getrennt betrachtet werden. Deshalb wird in diesem Abschnitt nur der Anteil der schwachen Form der Impulserhaltung behandelt, welcher durch den Spannungstensor höherer Ordnung bestimmt ist. Der Anteil aus der Standardtheorie wurde in den vorigen Abschnitten bereits genauer dargestellt. Bezüglich der Linearisierung gilt analoges, sodass auch für diese wesentliche Operation ebenso nur der aus der schwachen Form resultierende Anteil des Spannungstensors höherer Ordnung genauer untersucht und ausgewertet wird.

Ausgehend von der erweiterten Form der Impulserhaltungsgleichung (Rel. 3-57) kann der Anteil höherer Ordnung durch eine Substitution

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} = 0_k \Rightarrow s_k := \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\text{Rel. 4-52})$$

eingeführt und nachfolgend weiter untersucht sowie ausgewertet werden. Der aus dieser Definition resultierende Ausdruck ist nun zur weiteren Verwendung im Rahmen der FEM zu evaluieren:

$$s := \int_V s_k \cdot \xi_k dV = \int_V \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \xi_k dV \quad (\text{Rel. 4-53})$$

Ziel der Auswertung ist es eine dem Standardanteil analoge Darstellung zu erhalten, welche mögliche vorgegebene Randlasten aus Spannungstensen höher Ordnung enthalten bzw. beschreiben können. Dazu wird in einem Ersten Schritt der Integrand in Gleichung (Rel. 4-53) als modifizierter Ausgangsterm

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) \right] \quad (\text{Rel. 4-54})$$

herangezogen, und der innere Ausdruck durch Differentiation weiter ausgewertet:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) = \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \quad \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) \quad (\text{Rel. 4-55})$$

Aus (Rel. 4-55) resultieren dann folgende Terme

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k \right) = \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \xi_k + \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \quad \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) = \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} \quad (\text{Rel. 4-56})$$

welche wiederum in den Ausgangsausdruck (Rel. 4-54) rücksubstituierbar sind.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) = \\ &= \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \xi_k + \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-57})$$

Durch Umformung von (Rel. 4-57) kann der Integrand $s_k \cdot \xi_k$ in (Rel. 4-53) wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial x_i \partial x_j} \cdot \xi_k = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) - \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} = s_k \cdot \xi_k \quad (\text{Rel. 4-58})$$

In diesem Ausdruck (Rel. 4-58) sind die hier angeführten Substitutionen für weitere Umformungen zweckmäßig einzuführen:

$$^2s := \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) \quad j^i_s := \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \quad ij_s := \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \quad (\text{Rel. 4-59})$$

Damit kann der Anteil der schwachen Form der Impulsbilanzgleichung (Rel. 4-53) bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{ijk} mit

$$s := \int_V s_k \cdot \xi_k dV = \int_V \left(^2s - j^i_s - ij_s - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} \right) dV \quad (\text{Rel. 4-60})$$

geschrieben werden, wobei ij_s und j^i_s identisch sind, was wie folgt beweisbar ist.

Aus der Symmetriebedingung des Spannungstensors höherer Ordnung $\tau_{ijk} = \tau_{jik}$ ist durch Indexvertauschung

$$ij_s := \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{jik}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \quad j^i_s := \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{jik}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \Rightarrow ij_s = j^i_s =: ^1s \quad (\text{Rel. 4-61})$$

ersichtlich, dass die beiden Ausdrücke ij_s und j^i_s identisch sind und durch eine gemeinsame abkürzende Schreibweise 1s substituiert werden können.

Im Weiteren wird der Ausdruck $ij_s = ^1s$ untersucht, um die Spannungsrandbedingungen höherer Ordnung in die schwache Form mit einzubeziehen. Hierbei kann man völlig analog zu den vorherigen Schritten durch Anwendung der Produktdifferentiation vorgehen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) &= \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} = ij_s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} \\ \Rightarrow ij_s &= \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} = ^1s \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-62})$$

Rücksubstitution in den Subanteil aus der schwachen Form (Rel. 4-60) führt zusammen mit dem Gaußschen Divergenztheorem für Volumenintegrale zu

$$\begin{aligned} \int_V ij_s dV &= \int_V \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} dV = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} \right] dV = \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) dV - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} dV \\ \Rightarrow \int_V ij_s dV &= \int_{\partial V} \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \cdot n_i dA - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_i \partial x_j} dV = \int_V ^1s dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-63})$$

Da – wie zuvor gezeigt – die beiden Ausdrücke ij_s und j^i_s identisch sind, soll für den Fall eines nicht-symmetrischen Spannungstensors höherer Ordnung noch die analoge Umformung für $j^i_s = ^1s$ angegeben werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \right) &= \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} = j^i_s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} \\ \Rightarrow j^i_s &= \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \right) - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} = ^1s \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-64})$$

Die wiederholte Auswertung bezüglich des Subanteils aus der schwachen Form (Rel. 4-60) ergibt zusammen mit dem Gaußschen Divergenztheorem für Volumenintegrale schließlich den folgenden Term:

$$\begin{aligned} \int_V j^i_s dV &= \int_V \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} dV = \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \right) - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} \right] dV = \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \right) dV - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} dV \\ \Rightarrow \int_V j^i_s dV &= \int_{\partial V} \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \cdot n_j dA - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} dV = \int_V ^1s dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-65})$$

Der letzte Substitutionsausdruck 2s aus (Rel. 4-59) kann zu

$$^2s := \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\tau_{ijk} \cdot \xi_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_j} \right) \quad (\text{Rel. 4-66})$$

umgeformt und die daraus erhaltenen Terme weiter ausgewertet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) &= \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k + \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} = \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k + j^i s = \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k + {}^1 s \\ \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_j} \right) &= \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_i} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_j} + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} = j^i s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} = {}^1 s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-67})$$

Aus den beiden Evaluationen (Rel. 4-67) geht hervor, dass noch ein letzter Ausdruck

$${}^0 s := \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k \quad (\text{Rel. 4-68})$$

der Umformung mittels Produktdifferentiation unterzogen werden muss

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) &= \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k + \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} = {}^0 s + j^i s = {}^0 s + {}^1 s \\ \Rightarrow {}^0 s &= \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) - j^i s = \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) - {}^1 s \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-69})$$

um diesen Term (Rel. 4-69) für die Anwendung des Gaußschen Integralsatzes zu präparieren:

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} \cdot \xi_k dV &= \int_V \left[\frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) - \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} \right] dV = \\ &= \int_V \frac{\partial}{\partial X_i} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \right) dV - \int_V \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} dV = \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA - \int_V \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-70})$$

Daraus folgt schließlich die weiter verwendbare Darstellung

$$\int_V {}^0 s dV = \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA - \int_V j^i s dV = \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA - \int_V {}^1 s dV \quad (\text{Rel. 4-71})$$

Aus (Rel. 4-58) bzw. (Rel. 4-60) ergibt sich die Rücksubstitution der Größe ${}^2 s$

$${}^2 s = \frac{\partial^2 \tau_{ijk}}{\partial X_i \partial X_j} + j^i s + i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} = {}^0 s + j^i s + i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \quad (\text{Rel. 4-72})$$

zur Bestimmung des Volumenintegrals desselben Terms:

$$\begin{aligned} \int_V {}^2 s dV &= \int_V \left({}^0 s + j^i s + i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \right) dV = \\ &= \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA - \int_V j^i s dV + \int_V \left(i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \right) dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-73})$$

Durch Einsetzen von (Rel. 4-71) in das Volumenintegral (Rel. 4-73) ist dieses wie folgt darstellbar:

$$\int_V {}^2 s dV = \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA + \int_V \left(i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \right) dV \quad (\text{Rel. 4-74})$$

Mit (Rel. 4-74) kann jener Gesamtanteil s der schwachen Form der Impulsbilanzgleichung (Rel. 4-60) bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{ijk} durch einfache Rücksubstitution sämtlicher zuvor ermittelter Subanteile bestimmt werden:

$$\begin{aligned} s &= \int_V {}^2 s dV - \int_V j^i s dV - \int_V i^j s dV - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} dV = \\ &= \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial X_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA + \int_V \left(i^j s + \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \right) dV + \\ &\quad - \left(\int_{\partial V} \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial X_i} \cdot n_j dA - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_j \partial X_i} dV \right) + \\ &\quad - \int_V i^j s dV - \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-75})$$

Damit ergibt sich durch Umrechnung des Ausdrucks (Rel. 4-75) die vorläufige Endform des erweiterten Anteils der schwachen Form s (Rel. 4-60) in der Darstellung durch die vektorielle Testfunktion ξ_k und deren Ableitungen:

$$\begin{aligned}
s &= \int_{\partial V} \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k \cdot n_i dA - \int_{\partial V} \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \cdot n_j dA + \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} dV \\
s &= \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} dV + \int_{\partial V} \left(\frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot \xi_k \cdot n_i - \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \cdot n_j \right) dA
\end{aligned} \tag{Rel. 4-76}$$

Hierin beschreibt das Volumenintegral das durch die vorgegebenen eingeprägten Lasten induzierte Spannungsfeld, und das Oberflächenintegral die äußeren Belastungen, welche auf den Rand des Grundgebiets einwirken. Aus dem Oberflächenintegral ist zudem ersichtlich, dass neben den Spannungen höherer Ordnung auch die Divergenz derselben Spannungen höherer Ordnung vorzugeben ist, um so ein Problem eindeutig und vollständig zu beschreiben.

Es ist sinnvoll die Terme welche die äußeren Randlasten repräsentieren durch folgende Substitutionen

$$\partial \tau_k := \frac{\partial \tau_{ijk}}{\partial x_j} \cdot n_i \quad n \tau_{ik} := \tau_{ijk} \cdot n_j \tag{Rel. 4-77}$$

definierend einzuführen. Darin stellt $\partial \tau_k$ eine Randlastendetermination dar, welche die Änderungen der Spannungen höherer Ordnung entlang der Koordinatenrichtungen bezüglich des Oberflächennormalenvektors n_i beschreibt, und $n \tau_{ik}$ bestimmt die Vorgabe der Spannungen höherer Ordnung bezüglich der Oberflächennormalen n_j . Damit kann die schwache Form auch mit den eingeführten und im Allgemeinen vorgegebenen Randlasten $\partial \tau_k$, $n \tau_{ik}$ durch die zentrale Gleichung

$$s = \int_V \tau_{ijk} \cdot \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial x_j \partial x_i} dV + \int_{\partial V} \left(\partial \tau_k \cdot \xi_k - n \tau_{ik} \cdot \frac{\partial \xi_k}{\partial x_i} \right) dA \tag{Rel. 4-78}$$

ausgedrückt werden. Man beachte, dass die vorgegebenen Randspannungen $n \tau_{ik}$ höherer Ordnung keinen symmetrischen Tensor zweiter Stufe darstellen müssen, was unmittelbar aus der Indexkontraktion in (Rel. 4-77) ersichtlich ist.

Abschließend wird noch auf die äquivalente Darstellung des Anteils der schwachen Form bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung in Relation zur Formulierung mittels virtueller Verschiebungen im Kontext von Variationsformulierungen genauer eingegangen (vgl. Abschnitt 3.2). Aus der Definition des Verzerrungsgradiententensor (Rel. 3-34) kann der Anteil der schwachen Form s (Rel. 4-76) bzw. (Rel. 4-78), welche aus den Spannungen höherer Ordnung resultiert, unter Zuhilfenahme des Variationsoperators (Rel. 4-8) umgeschrieben werden. Es sei hier nochmals darauf verwiesen, dass die eigentlich unbekannte Größe das Verschiebungsfeld u_k darstellt, welches eine Funktion des Ortes ist:

$$u_k = \hat{u}_k(X_i) \tag{Rel. 4-79}$$

Das in (Rel. 4-79) unbekannte Verschiebungsfeld u_k stellt im Kontext des Anteils der schwachen Form s , welcher wiederum als Funktionalausdruck angesehen werden kann, eine unabhängige Größe dar, bezüglich der die Variationsoperationen durchzuführen sind. Daraus resultieren bei der Formulierung mittels eines Gesamtpotenzialfunktional dieselben Gleichungen, die man aus der Methode der gewichteten Residuen erhält.

Die erste Variation des Verschiebungsfeldes ist durch elementares Einsetzen in die Definition des Variationsoperators einfach bestimmbar und durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\delta \hat{u}_k(X_a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\left(\hat{u}_k(X_a) + \alpha \cdot \hat{\xi}_k(X_a) \right) \right] = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \hat{\xi}_k(X_a) = \hat{\xi}_k(X_a) = \xi_k \tag{Rel. 4-80}$$

Geht man davon aus, dass die Differentiationsreihenfolge vertauschbar ist, so folgt unmittelbar aus der Definition des Verzerrungsgradiententensors die Symmetrie desselben:

$$\eta_{ijk} = \hat{\eta}_{ijk}(X_a) = \frac{\partial^2 \hat{u}_k(X_a)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 \hat{u}_k(X_a)}{\partial x_j \partial x_i} = \hat{\eta}_{jik}(X_a) = \eta_{jik} \tag{Rel. 4-81}$$

Führt man nun die erste Variation des symmetrischen Verzerrungsgradiententensor (Rel. 4-81) aus, so ergibt sich durch Einsetzen in die Definitionsgleichung der Variation

$$\delta \hat{\eta}_{ijk}(X_a) = \delta \frac{\partial^2 \hat{u}_k(X_a)}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_j} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\left(\frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Big|_{u_k \mapsto u_k + \alpha \cdot \xi_k} \right] \tag{Rel. 4-82}$$

und Auswerten der Ausdruck

$$\delta \hat{\eta}_{ijk}(X_a) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{\partial^2 (u_k + \alpha \cdot \xi_k)}{\partial X_i \partial X_j} \right] \quad (\text{Rel. 4-83})$$

Daraus erhält man durch Vertauschung der Differentiationsreihenfolge

$$\delta \eta_{ijk} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} (u_k + \alpha \cdot \xi_k) \right] = \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left\{ \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \alpha} [\hat{u}_k(X_a) + \alpha \cdot \hat{\xi}_k(X_a)] \right\} \quad (\text{Rel. 4-84})$$

und einfache Evaluierung schließlich folgende Darstellung:

$$\delta \hat{\eta}_{ijk}(X_a) = \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left\{ \lim_{\alpha \rightarrow 0} [\hat{\xi}_k(X_a)] \right\} = \frac{\partial^2 \hat{\xi}_k(X_a)}{\partial X_i \partial X_j} \Leftrightarrow \delta \eta_{ijk} = \frac{\partial^2 \xi_k}{\partial X_i \partial X_j} \quad (\text{Rel. 4-85})$$

Aus obigen Ausdruck (Rel. 4-85) lässt sich zusammen mit der ersten Variation des Verschiebungsfeldes δu_k (Rel. 4-80) sowie aus dessen Gradienten δH_{ki} (Rel. 4-10) der Anteil der schwachen Form (Rel. 4-78) bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung folgendermaßen reformulieren:

$$s = \int_V \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} dV + \int_{\partial V} (\partial \tau_k \cdot \delta u_k - {}^n \tau_{ik} \cdot \delta H_{ki}) dA \quad (\text{Rel. 4-86})$$

Darin ist eine zur Standardbeschreibung (Rel. 4-43) analoge Darstellung zu erkennen, welche den Anteil der schwachen Form des Cauchyschen Spannungstensors zweiter Stufe berücksichtigt.

4.2.2 Ermittlung der Linearisierung

Da es sich bei dem skalenabhängigen Materialmodell um ein nichtlineares Stoffgesetz handelt (vgl. Abschnitt 3.3), kann das resultierende Gleichungssystem im Rahmen der FEM nur in einem iterativen Lösungsprozess numerisch berechnet werden. Dazu wird ein Newtonverfahren herangezogen, wofür die Linearisierung von s (Rel. 4-86), der den Anteil der schwachen Form bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung darstellt, zu bestimmen ist. Hierbei ist es zweckmäßig den in Abschnitt 4.1.3 eingeführten Linearisierungsoperator (Rel. 4-30) zu verwenden, der wie der Variationsoperator im Wesentlichen eine Richtungsableitung darstellt. Dieser Operator ergibt sich aus dem linearen Glied der inkrementellen Form der Taylorreihenentwicklung, vgl. (Rel. 4-28). Da aufgrund des gewählten Beschreibungsansatzes das Verschiebungsfeld u_k die eigentliche Unbekannte darstellt und somit formal als variable Größe bezüglich der Linearisierungsoperationen anzusehen ist, ist es in den folgenden Ausführungen zur verkürzten Schreibweise zweckmäßig wieder die reduzierte Notation (Rel. 4-31) zu verwenden. Aus der Definition des Linearisierungsoperators ist zudem erkennbar, dass dieser die fundamentalen Eigenschaften der Differentialrechnung erfüllen muss, wie beispielsweise Produktregel, Kettenregel usw.

Im Weiteren ist es sinnvoll, den Spannungstensor höherer Ordnung τ_{ijk} im Kontext des Linearisierungsprozesses als Funktion unterschiedlicher Größen anzusehen, wie bspw. vom (gesuchten) Verschiebungsfeld u_k oder aber auch von diesem wiederum abhängigen Verzerrungsfeld ε_{ij} bzw. dessen Gradienten η_{ijk} , etc.:

$$\tau_{ijk} = \hat{\tau}_{ijk}(\hat{u}_a(X_b)) = \hat{\tau}_{ijk}(u_a) = \dots \quad (\text{Rel. 4-87})$$

Mit der Anwendung der Linearisierungsoperation auf s (Rel. 4-86) folgt unmittelbar der Ausdruck, der dann im Rahmen der FEM die Koeffizientenmatrix des zu lösenden Gleichungssystems determiniert:

$$\begin{aligned} \Delta s &= \Delta \left[\int_V \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} dV + \int_{\partial V} (\partial \tau_k \cdot \delta u_k - {}^n \tau_{ik} \cdot \delta H_{ki}) dA \right] \\ \Delta s &= \Delta \int_V \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} dV + \underbrace{\Delta \int_{\partial V} (\partial \tau_k \cdot \delta u_k - {}^n \tau_{ik} \cdot \delta H_{ki}) dA}_0 \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-88})$$

Für verformungsunabhängige äußere Randlasten folgt wiederum, dass die Spannungsgrößen $\partial \tau_k$, ${}^n \tau_{ik}$ am Rand des Gebiets nur Funktionen vom Ort und nicht vom gesuchten Verschiebungsfeld u_k sein können. Daraus resultiert unmittelbar, dass der linearisierte 2. Term in obiger Gleichung (Rel. 4-88) verschwindet, womit man durch Einsetzen und Auswerten den Ausdruck

$$\Delta s = \Delta \int_V \hat{\tau}_{ijk}(\hat{u}_a(X_b)) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk}(X_b) dV = \int_V \Delta \hat{\tau}_{ijk}(\hat{u}_a(X_b)) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk}(X_b) dV \quad (\text{Rel. 4-89})$$

erhält. Die Darstellung des linearisierten Spannungstensors höherer Ordnung $\Delta\tau_{ijk}$ erfolgt zweckmäßigerweise durch die partiellen Ableitungen der verwendeten Verzerrungstensenoren ε_{ij} sowie deren Gradienten η_{ijk} , was aber an dieser Stelle noch nicht in der gerade beschriebenen Form berücksichtigt worden ist. Dazu wird für den erweiterten Anteil der Spannungs- Verzerrungsbeziehung, resultierend aus den Ausführungen bezüglich des mikrostrukturell motivierten Konstitutivgesetzes (vgl. Abschnitt 3.3), folgende Darstellungsweise angenommen:

$$\tau_{ijk} := \hat{\tau}_{ijk}(\hat{\varepsilon}_{cd}(\hat{u}_a(X_b)), \hat{\eta}_{pqr}(\hat{u}_a(X_b))) := \hat{\tau}_{ijk}(\hat{\varepsilon}_{cd}(\hat{H}_{st}(\hat{u}_a(X_b))), \hat{\eta}_{pqr}(\hat{u}_a(X_b))) \quad (\text{Rel. 4-90})$$

Mit Hilfe dieser Ansätze lässt sich die Linearisierung Δ von τ_{ijk} durch verschiedene Darstellungsformen beschreiben, welche jedoch ganz spezifische unterschiedliche Abhängigkeiten beschreiben, wobei die angesetzten Argumente Größen darstellen, welche die Deformationszustände entsprechend quantifizieren. Anders ausgedrückt ist eine Notation des Konstitutivgesetzes zu verwenden, welche die spezifischen Eigenschaften des Materialmodells zweckmäßig abbildet.

Aus der hier gewählten und an das Materialmodell der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ zweckmäßig angepassten Darstellung des Konstitutivgesetzes folgt für die Linearisierung der Spannungen höherer Ordnung

$$\begin{aligned} \Delta\tau_{ijk} &= \Delta\hat{\tau}_{ijk}(\hat{\varepsilon}_{cd}(\hat{H}_{st}(\hat{u}_a(X_b))), \hat{\eta}_{pqr}(\hat{u}_a(X_b))) \\ \Delta\tau_{ijk} &= \frac{\partial\hat{\tau}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial\varepsilon_{mn}} \cdot \frac{\partial\hat{\varepsilon}_{mn}(H_{st})}{\partial H_{gh}} \cdot \Delta H_{gh} + \frac{\partial\hat{\tau}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial\eta_{mno}} \cdot \Delta\eta_{mno} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-91})$$

eine Summe aus zwei Anteilen, die jeweils aus den Abhängigkeiten der infinitesimalen Verzerrungen ε_{mn} sowie deren Gradienten η_{mno} resultieren. Hierin bezeichnet man analog zum Abschnitt 4.1.3 die partiellen Ableitungen des Spannungstensors höherer Ordnung τ_{ijk} nach dem infinitesimalen Verzerrungstensor ε_{mn} sowie dessen Gradienten η_{mno} als Materialtangente. Diese Materialtangente werden mit der verkürzten Notation

$${}^\varepsilon C_{ijkmn} := \frac{\partial\hat{\tau}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial\varepsilon_{mn}} \quad {}^\eta C_{ijkmno} := \frac{\partial\hat{\tau}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial\eta_{mno}} \quad (\text{Rel. 4-92})$$

dargestellt und sind offensichtlich Tensoren 5. (${}^\varepsilon C_{ijkmn}$) bzw. 6. Stufe (${}^\eta C_{ijkmno}$). Die Auswertung der Ableitungen dieser Tensoren wird in dieser Arbeit nicht genauer spezifiziert, da die hierzu notwendigen Berechnungen sehr aufwändig sind und deshalb mittels eines Computer Algebra Systems (CAS) durchgeführt wurden. Aus den durch das CAS (Wolfram, 2003) ermittelten Ausdrücken wurde in einem weiteren Schritt automatisch der Quellcode für die Materialtangente generiert, der dann bei der FEM Implementierung weiter verwendet wurde.

Die Linearisierung des infinitesimalen Verzerrungstensors ΔH_{gh} wurde schon in (Rel. 4-48) berechnet, wobei in diesem Zusammenhang auch die Ableitung des infinitesimalen Verzerrungstensors ε_{mn} nach dem Verschiebungsgradienten H_{gh} bestimmt worden ist (Rel. 4-49). Zudem kann auch an diesem Zusammenhang die Linearisierung des Green-Lagrangeschen Verzerrungstensors (Rel. 4-51) verwendet werden, da sich dieser elementar durch den Verschiebungsgradienten ausdrücken lässt. Damit kann man die Linearisierung des Spannungstensors höherer Ordnung in äquivalenter alternativer Form darstellen:

$$\Delta\tau_{ijk} = {}^\varepsilon C_{ijkmn} \cdot \Delta\varepsilon_{mn} + {}^\eta C_{ijkmno} \cdot \Delta\eta_{mno} \quad \text{mit} \quad \Delta\varepsilon_{mn} = \frac{\partial\hat{\varepsilon}_{mn}(H_{st})}{\partial H_{gh}} \cdot \Delta H_{gh} \quad (\text{Rel. 4-93})$$

Für den Verzerrungsgradiententensor η_{mno} , welcher in der vorliegenden Arbeit eine der zentralen Größen im skalenabhängigen Materialmodell ist, kann die Linearisierung, aus der Definition dieses Operators resultierend, ebenfalls durch folgende elementare Rechnungen

$$\Delta\hat{\eta}_{ijk}(u_k) = \Delta \frac{\partial^2 \hat{u}_k(X_a)}{\partial X_i \partial X_j} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\left(\frac{\partial^2 u_k}{\partial X_i \partial X_j} \right) \right]_{u_k \mapsto u_k + \alpha \cdot \Delta u_k} \right\} \Big|_{\alpha=0} = \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{\partial^2 (u_k + \alpha \cdot \Delta u_k)}{\partial X_i \partial X_j} \right] \right\} \Big|_{\alpha=0} \quad (\text{Rel. 4-94})$$

und weitere Umformungen

$$\Delta\hat{\eta}_{ijk}(\hat{u}_k(X_a)) = \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} [u_k + \alpha \cdot \Delta\hat{u}_k(X_a)] \right\} \Big|_{\alpha=0} = \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} [\Delta\hat{u}_k(X_a)] \Big|_{\alpha=0} \quad (\text{Rel. 4-95})$$

schließlich mit

$$\Delta \hat{\eta}_{ijk}(\hat{u}_k(X_a)) = \frac{\partial^2 \Delta \hat{u}_k(X_a)}{\partial X_i \partial X_j} = \Delta \hat{\eta}_{ijk}(u_k) = \Delta \eta_{ijk} \quad (\text{Rel. 4-96})$$

angegeben werden. Somit ist die Linearisierung der schwachen Form (Rel. 4-89) bezüglich des Spannungstensors höherer Ordnung durch Rücksubstitution der eben berechneten Ausdrücke (Rel. 4-91), (Rel. 4-92) und (Rel. 4-93) sowie (Rel. 4-48) und (Rel. 4-49) durch

$$\begin{aligned} \Delta S &= \int_V \frac{\partial \hat{\eta}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial \varepsilon_{mn}} \cdot \Delta \varepsilon_{mn} \cdot \delta \eta_{ijk} dV + \int_V \frac{\partial \hat{\eta}_{ijk}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})}{\partial \eta_{mno}} \cdot \Delta \eta_{mno} \cdot \delta \eta_{ijk} dV \\ \Delta S &= \int_V \frac{1}{2} \cdot \varepsilon C_{ijklmn} \cdot (\delta_{mg} \cdot \delta_{nh} + \delta_{ng} \cdot \delta_{mh}) \cdot \frac{\partial \Delta u_g}{\partial X_h} \cdot \delta \eta_{ijk} dV + \\ &+ \int_V \eta C_{ijklmno} \cdot \frac{\partial^2 \Delta \hat{u}_o(X_a)}{\partial X_m \partial X_n} \cdot \delta \eta_{ijk} dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-97})$$

gegeben.

Abschließend ist es wichtig darauf zu verweisen, dass bei der hier beschriebenen Vorgehensweise die Abhängigkeiten der Cauchyspannungen $\hat{\sigma}_{ij}(\varepsilon_{cd}, \eta_{pqr})$ von den infinitesimalen Verzerrungsgrößen ε_{ij} und deren Gradienten η_{ijk} formal angesetzt und berücksichtigt werden muss. Da aber der Spannungstensor des Standardanteils σ_{ij} keine Funktion des Verzerrungsgradienten $\hat{\sigma}_{ij}(\varepsilon_{cd})$ ist (siehe Abschnitt 3.3), verschwindet der entsprechende Teil des Tangentenmoduls, weshalb nur die Steifigkeit $\hat{D}_{kimn}(\varepsilon_{ab})$ (Rel. 4-50) aus dem im Abschnitt 4.1 beschriebenen Ansatz miteinzubeziehen ist.

4.3 Beschreibung und Darstellung der Elementdiskretisierung

Ein wesentlicher Teil der finiten Element Methode (FEM) besteht in der Diskretisierung des räumlichen Gebiets auf dem das (gekoppelte) partielle Differentialgleichungssystem zu lösen ist. Die einzelnen Teilbereiche in dieser Diskretisierung werden als Elemente bezeichnet. Die Diskretisierung muss dabei bestimmten Bedingungen genügen, wobei eine wesentliche Anforderung dadurch gegeben ist, dass die Vereinigungsmenge aller Elemente das Gesamtgebiet abbildet. Zudem müssen die Elemente paarweise zueinander disjunkt sein, was anschaulich so zu interpretieren ist, dass kein Teilbereich von verschiedenen Elementen mehrfach abgebildet bzw. beschrieben werden darf. Innerhalb jedes Elements wird eine dem Problem angepasste Ansatzfunktion gewählt, welche die zu erwartende Lösung des (Mehr-)Feldproblems ausreichend gut approximieren kann. Die Wahl dieser Funktionen hat zusammen mit der Art der Elementformulierung (bspw. gemischte Elementformulierung mit statischer Kondensation der Freiheitsgrade (Schwarz, 1980), Inkompressibilität, konform- und nichtkonforme Elemente, etc. ...) einen entscheidenden Einfluss auf das Konvergenzverhalten des resultierenden Gesamtgleichungssystems sowie auf die Genauigkeit der Lösung. Folglich ist das gesamte zu beschreibende (gekoppelte) partielle Differentialgleichungssystem sowie deren zugeordnete schwache Form im Element enthalten bzw. abgebildet und muss in entsprechenden Elementroutinen im Rahmen eines FEM-Softwarepakets implementiert werden. Dafür haben sich im Laufe der Zeit zweckmäßige Vorgehensweisen etabliert die teilweise in einer eher allgemeineren Form in diesem Abschnitt beschrieben werden. Die Methoden, Vorgehensweisen und Ansätze, welche sich durch die Entwicklung und Anwendung der FEM etabliert und als zweckmäßig sowie vorteilhaft erwiesen haben, werden als Finite Element Technologie bezeichnet. Diese kann als eigenständige Disziplin im Rahmen der FEM angesehen werden und beschäftigt sich schwerpunktmäßig mit der softwaretechnischen Umsetzung sowie effizienten Algorithmen bei der Lösung der immer komplexer werdenden, meist gekoppelten und stark nichtlinearen Problemklassen (Smith & Griffiths, 2005), (Schwarz, 1991).

Da sich die Ausführungen in diesem Abschnitt auf die Ebene eines einzelnen Elementes beziehen, werden im Nachfolgenden nur die allgemein gültigen Zusammenhänge erläutert, um so ein generelles Konzept für die Implementierung spezieller Elementtypen bereitzustellen. Hierzu kommt das bewährte isoparametrische Konzept zur Anwendung, mit dem die Evaluierungen in einem transformierten Einheitsgebiet durchgeführt werden, wodurch sich die durchzuführenden Operationen vereinheitlichen und vereinfachen lassen. Abschließend soll noch kurz erwähnt werden, was man unter dem Terminus „isoparametrischen Konzept“ versteht. Grundsätzlich werden bei dieser Beschreibungs- bzw. Darstellungsweise die gleichen Ansatzfunktionen - und somit dieselben Formfunktionen - sowohl für die Variablentransformation als auch für die gesuchte Feldgröße verwendet.

4.3.1 Ansatzfunktionen und Variablentransformation

Um das resultierende nichtlineare Gesamtgleichungssystem im Rahmen der FEM aufstellen zu können, müssen auf Elementebene Integrale der schwachen Form bestimmt bzw. ausgewertet werden, welche sich sowohl aus Anteilen der Standard- (Rel. 4-50) als auch der erweiterten Theorie höherer Ordnung (Rel. 4-97) zusammensetzen. Die unterschiedlichen Anteile der schwachen Form der Impulsbilanzgleichung müssen überall innerhalb des zu beschreibenden Gebiets Gültigkeit haben. Folglich sind auch auf Elementebene (eV) die Ausdrücke (Rel. 4-50) und (Rel. 4-97) zu erfüllen, womit man nachfolgende Terme erhält:

$$\begin{aligned}\Delta g &= \int_{^eV} D_{kimn} \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} (^e u_a) \cdot \delta \hat{\varepsilon}_{ki} (^e X_b) dV \\ \Delta s^\varepsilon &= \int_{^eV} {}^\varepsilon C_{ijkmn} \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} (^e u_a) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} (^e X_b) dV \\ \Delta s^\eta &= \int_{^eV} {}^\eta C_{ijk mno} \cdot \Delta \hat{\eta}_{mno} (^e u_a) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} (^e X_b) dV\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-98})$$

Hierin sind die kinematischen Größen $\Delta \hat{\varepsilon}_{mn} (^e u_a (^e X_b))$ bzw. $\delta \hat{\varepsilon}_{ki} (^e X_b)$ und $\Delta \hat{\eta}_{mno} (^e u_a (^e X_b))$ bzw. $\delta \hat{\eta}_{ijk} (^e X_b)$, welche die Linearisierung bzw. erste Variation des Verzerrungstensors und dessen Gradienten darstellen, durch eine entsprechende Linearkombination aus Formfunktionen anzusetzen, die dann die Elementansatzfunktion repräsentiert. Die hier nachfolgend eingeführten Formfunktionen

$$N_I := \tilde{N}_I(\zeta_q) \quad (\text{Rel. 4-99})$$

sind zweckmäßigerweise in einem transformierten ζ_q -Raum definiert, wobei die Variablentransformation durch das isoparametrische Konzept mit

$$^e X_i := {}^e \tilde{X}_i(\zeta_q) := \sum_{I=1}^{^e n} \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}^e X_i \quad (\text{Rel. 4-100})$$

festgelegt ist. Dabei symbolisiert $^e n$ die Anzahl der Elementknoten, und ${}^e X_i$ die Knotenkoordinaten des Elements. Zusätzlich wird verlangt, dass die transformierten Koordinaten auf das Intervall

$$\zeta_q \in [-1, +1] \times \dots \times [-1, +1] = [-1, +1]^{\dim n} \quad \text{mit } q \leq \dim n \quad (\text{Rel. 4-101})$$

abgebildet werden sollen damit sich die nachfolgenden numerischen Operationen stets auf ein einheitlich und geometrisch einfach zu behandelndes Gebiet beschränken. Für die Form der Ansatzfunktion (Linearkombination) ist es essentiell, dass die Formfunktionen N_I bezüglich des assoziierten Knotens I im entsprechenden Knotenpunkt den Wert Eins (=1) annimmt, wohingegen die Formfunktion in den anderen Knotenpunkten verschwinden muss (=0). Damit wird sichergestellt, dass die Eckpunkte des Elements, welche stets auch Elementknoten darstellen, auf Eckpunkte im transformierten Raum mit den Koordinaten +1 oder -1 abgebildet werden. In diesem Zusammenhang ist es auch wichtig zu verlangen, dass die Formfunktionen der Bedingung

$$N_I \in [-1, +1] \quad \forall \quad I \in \{1 \dots {}^e n\} \quad (\text{Rel. 4-102})$$

genügen. Geht man von der Annahme der eindeutigen Umkehrbarkeit der eben eingeführten Koordinatentransformation aus, so können die folgen Zusammenhänge

$$^e X_i := {}^e \tilde{X}_i(\zeta_q) \Rightarrow {}^e \tilde{X}_i^{-1}({}^e X_q) = \zeta_i \Rightarrow \zeta_i := \hat{\zeta}_i({}^e X_q) \quad (\text{Rel. 4-103})$$

und Definitionen festgehalten werden.

Zusätzlich sind an die Differenzierbarkeit der Formfunktionen noch bestimmte Anforderungen zu stellen, welche in unmittelbaren Zusammenhang mit dem zu beschreibenden Feldproblem stehen. Auf sie wird hier nicht genauer eingegangen, sie haben jedoch auf die Existenz von Lösungen, die Stabilität der Numerik und die Konvergenz der FEM einen entscheidenden Einfluss. Aufgrund des isoparametrischen Konzepts ist auch das in jedem Newton-Iterationsschritt gesuchte Inkrement des Verschiebungsfeldes Δu_i mittels der Ansatzfunktionen N_I in analoger Weise durch

$$^e \Delta u_i := {}^e \tilde{\Delta u}_i(\zeta_q) := \sum_{I=1}^{^e n} \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}^e \Delta u_i \quad (\text{Rel. 4-104})$$

auf Elementebene definiert. An dieser Stelle ist es wichtig darauf zu verweisen, dass hier der griechische Buchstabe Δ Teil der (unbekannten) Symbole ${}^e\Delta u_i$ bzw. ${}^e\Delta \tilde{u}_i(\zeta_q)$ und ${}_I^e\Delta u_i$ ist, und nicht als Operator zu interpretieren ist. Dabei stellen die Symbole ${}^e\Delta u_i$ bzw. ${}^e\Delta \tilde{u}_i(\zeta_q)$ die gesuchten Funktionen an sich, und die Variablen ${}_I^e\Delta u_i$ die unbekannten skalaren Größen dar, welche später aus dem nichtlinearen Gleichungssystem ermittelt werden. Die Formfunktionen $\tilde{N}_I(\zeta_q)$ werden problemspezifisch angesetzt, und sind somit als bekannt anzusehen. Aus diesem Ansatz für das Verschiebungsinkrement ist es leicht nachvollziehbar, dass das Verschiebungsfeld des Gesamtproblems durch

$${}^e u_i := {}^e \tilde{u}_i(\zeta_q) := \sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}_I^e u_i \quad (\text{Rel. 4-105})$$

darstellbar ist, weil in jedem Newton-Iterationsschritt ein additiver Update aus den Verschiebungsinkrementen erfolgt. Wegen der eindeutigen Umkehrbarkeit der Koordinatentransformation (Rel. 4-103) müssen die folgenden Definitionsgleichungen

$$\begin{aligned} {}^e\Delta u_i &= {}^e\Delta \tilde{u}_i(\zeta_q) = {}^e\Delta \tilde{u}_i(\hat{\zeta}_q({}^e X_p)) := {}^e\Delta \hat{u}_i({}^e X_p) = {}^e\Delta \hat{u}_i({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q)) \\ {}^e u_i &= {}^e \tilde{u}_i(\zeta_q) = {}^e \tilde{u}_i(\hat{\zeta}_q({}^e X_p)) := {}^e \hat{u}_i({}^e X_p) = {}^e \hat{u}_i({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q)) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-106})$$

gelten.

Das Konzept der FEM basiert im Wesentlichen auf der Methode der gewichteten Residuen, bei dem sich die Ansatzfunktionen bezüglich der gesuchten Feldgröße von den Ansätzen für die Gewichts- bzw. Testfunktionen im Allgemeinen unterscheiden. Eine spezielle Adaption dieser Methode ist das Verfahren nach Galerkin, bei dem die Typen der Ansatzfunktionen der Feldgrößen mit denen der Gewichtsfunktionen identisch sind. Im nächsten Schritt wird nun die Integration der Terme (Rel. 4-98)

$$\begin{aligned} \Delta g &= \int_{e_V} \hat{D}_{kimn} \left({}^e \hat{u}_s({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q)) \right) \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} \left({}^e \hat{u}_t({}^e \tilde{X}_v(\zeta_w)) \right) \cdot \delta \hat{\varepsilon}_{ki} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \\ \Delta s^\varepsilon &= \int_{e_V} {}^\varepsilon \hat{C}_{ijkmn} \left({}^e \hat{u}_g({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q)) \right) \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} \left({}^e \hat{u}_t({}^e \tilde{X}_v(\zeta_w)) \right) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \\ \Delta s^\eta &= \int_{e_V} {}^\eta \hat{C}_{ijkmno} \left({}^e \hat{u}_g({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q)) \right) \cdot \Delta \hat{\eta}_{mno} \left({}^e \hat{u}_t({}^e \tilde{X}_v(\zeta_w)) \right) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-107})$$

bezüglich der transformierten Koordinaten ζ_q reformuliert. Hierdurch resultieren auf Elementebene die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \Delta g &= \int_{e_V} \hat{D}_{kimn} \left({}^e \tilde{u}_s(\zeta_q) \right) \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} \left({}^e \tilde{u}_t(\zeta_w) \right) \cdot \delta \hat{\varepsilon}_{ki} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \\ \Delta s^\varepsilon &= \int_{e_V} {}^\varepsilon \hat{C}_{ijkmn} \left({}^e \tilde{u}_g(\zeta_w) \right) \cdot \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} \left({}^e \tilde{u}_t(\zeta_w) \right) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \\ \Delta s^\eta &= \int_{e_V} {}^\eta \hat{C}_{ijkmno} \left({}^e \tilde{u}_g(\zeta_q) \right) \cdot \Delta \hat{\eta}_{mno} \left({}^e \tilde{u}_t(\zeta_w) \right) \cdot \delta \hat{\eta}_{ijk} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-108})$$

woraus man schließlich die Terme

$$\begin{aligned} \Delta g &= \int_{e_V} \tilde{D}_{kimn}(\zeta_q) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{mn}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ki}(\zeta_b) dV \\ \Delta s^\varepsilon &= \int_{e_V} {}^\varepsilon \tilde{C}_{ijkmn}(\zeta_w) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{mn}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) dV \\ \Delta s^\eta &= \int_{e_V} {}^\eta \tilde{C}_{ijkmno}(\zeta_q) \cdot \Delta \tilde{\eta}_{mno}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) dV \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-109})$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{kimn}(\zeta_q) &:= \hat{D}_{kimn} \left({}^e \tilde{u}_s(\zeta_q) \right) \\ {}^\varepsilon \tilde{C}_{ijkmn}(\zeta_w) &:= {}^\varepsilon \hat{C}_{ijkmn} \left({}^e \tilde{u}_g(\zeta_w) \right) \quad {}^\eta \tilde{C}_{ijkmno}(\zeta_q) := {}^\eta \hat{C}_{ijkmno} \left({}^e \tilde{u}_g(\zeta_q) \right) \\ \Delta \tilde{\varepsilon}_{mn}(\zeta_w) &:= \Delta \hat{\varepsilon}_{mn} \left({}^e \tilde{u}_t(\zeta_w) \right) \quad \delta \tilde{\varepsilon}_{ki}(\zeta_b) := \delta \hat{\varepsilon}_{ki} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) \\ \Delta \tilde{\eta}_{mno}(\zeta_w) &:= \Delta \hat{\eta}_{mno} \left({}^e \tilde{u}_t(\zeta_w) \right) \quad \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) := \delta \hat{\eta}_{ijk} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b) \right) \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-110})$$

erhält. Aus der Analysis ist bekannt, dass sich bei der gegebenen Variablentransformation (Rel. 4-100) bzw. (Rel. 4-103) die Integrale aus (Rel. 4-109) durch

$$\begin{aligned}\Delta g &= \int_{e\Omega} \tilde{D}_{kimn}(\zeta_q) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{mn}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ki}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{\partial \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega \\ \Delta s^\varepsilon &= \int_{e\Omega} \tilde{\varepsilon}_{ijkmn}(\zeta_w) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{mn}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{\partial \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega \\ \Delta s^\eta &= \int_{e\Omega} \tilde{\eta}_{ijkmno}(\zeta_q) \cdot \Delta \tilde{\eta}_{mno}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{\partial \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-111})$$

darstellen lassen. Hierbei beschreibt die Größe

$${}^e J_{st} := {}^e \hat{J}_{st}({}^e X_a) := \frac{\partial {}^e \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} = \frac{\partial {}^e X_s}{\partial \zeta_t} \quad (\text{Rel. 4-112})$$

die Funktionalmatrix (auch Jacobimatrix genannt), und ${}^e \Omega$ das zu integrierende elementbezogene Einheitsgebiet im transformierten ζ_q -Raum. Die Jacobimatrix lässt sich mit Hilfe der Variablentransformation (Rel. 4-100) auch durch den Ausdruck

$${}^e J_{st} = {}^e \hat{J}_{st}({}^e X_a) = {}^e \hat{J}_{st}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_u)) =: {}^e \tilde{J}_{st}(\zeta_a) \quad (\text{Rel. 4-113})$$

darstellen.

4.3.2 Elementformulierung kinematischer Größen

In diesem Unterabschnitt werden die Variations- und Linearisierungsoperationen der verschiedenen kinematischen Größen bezüglich der noch allgemein gehaltenen Ansatzfunktionen für die erweiterte und standardisierte Theorie unter Miteinbeziehung der zuvor eingeführten Einheitskoordinatentransformation (vgl. Abschnitt 4.3.1) reformuliert.

4.3.2.1 Erweiterte Theorie höherer Ordnung

Im Folgenden wird die linearisierte Größe des Verzerrungsgradienten genauer untersucht, welche durch Einsetzen der Variablentransformationsbeziehung (Rel. 4-100) auf Elementebene durch (Rel. 4-110) bzw. den Ausdruck

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk} \left({}^e \hat{u}_a \left({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q) \right) \right) = \frac{\partial^2}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} {}^e \hat{u}_k \left({}^e \tilde{X}_p(\zeta_q) \right) = \frac{\partial^2}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q) = \Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) \quad (\text{Rel. 4-114})$$

dargestellt werden kann. Dies ist möglich, da die unterschiedlichen Anteile der schwachen Form der Impulsbilanzgleichung überall innerhalb des zu beschreibenden Gebiets Gültigkeit haben müssen und somit auch auf Elementebene zu erfüllen sind. Aus der Annahme der eindeutigen Umkehrbarkeit der Koordinatentransformation (Rel. 4-103) resultiert wiederum nachfolgende äquivalente Darstellungsform:

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \frac{\partial^2}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q) = \frac{\partial^2}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} {}^e \Delta \tilde{u}_k \left(\hat{\zeta}_q({}^e X_p) \right) \quad (\text{Rel. 4-115})$$

Durch Anwenden der Kettenregel auf diesen Term (Rel. 4-115) erhält man

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \frac{\partial}{\partial {}^e X_i} \left[\frac{\partial}{\partial {}^e X_j} {}^e \Delta \tilde{u}_k \left(\hat{\zeta}_q({}^e X_p) \right) \right] = \frac{\partial}{\partial {}^e X_i} \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_l} \cdot \frac{\partial \hat{\zeta}_l({}^e X_p)}{\partial {}^e X_j} \right] \quad (\text{Rel. 4-116})$$

woraus mit wiederholter Differentiation nach der Produkt- und Kettenregel schließlich

$$\begin{aligned}\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) &= \frac{\partial}{\partial {}^e X_i} \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_l} \right] \cdot \frac{\partial \hat{\zeta}_l({}^e X_p)}{\partial {}^e X_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_l} \cdot \frac{\partial}{\partial {}^e X_i} \left[\frac{\partial \hat{\zeta}_l({}^e X_p)}{\partial {}^e X_j} \right] \\ \Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) &= \frac{\partial^2 {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot \frac{\partial \hat{\zeta}_m({}^e X_a)}{\partial {}^e X_i} \cdot \frac{\partial \hat{\zeta}_l({}^e X_p)}{\partial {}^e X_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_l} \cdot \frac{\partial^2 \hat{\zeta}_l({}^e X_p)}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j}\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-117})$$

hervorgeht.

Wichtig bei der Bestimmung der partiellen Ableitungen nach den Ortskoordinaten X_i ist die Tatsache, dass die Formfunktionen - und somit auch die Koordinatentransformationsvorschrift - nur durch die transformierten Einheitskoordinaten ζ_q ausgedrückt wird. Da eine explizite Umkehrung der Koordina-

tentransformation (Rel. 4-103) zu aufwendig ist, weil dies im Allgemeinen auf die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems führt, ist man bestrebt die Ableitungen nach den Ortskoordinaten durch jene der Einheitskoordinaten im transformierten Raum auszudrücken, was unter Zuhilfenahme der Funktionalmatrix auch durchgeführt werden kann. Dazu geht man von der Identität

$$\frac{\partial \zeta_i}{\partial \zeta_j} = \delta_{ij} \Rightarrow \frac{\partial \zeta_i({}^e X_a)}{\partial \zeta_j} = \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial \zeta_j} = \delta_{ij} \quad (\text{Rel. 4-118})$$

aus, aus der mittels elementarer Differentiation die fundamentale Beziehung

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial \zeta_j} &= \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} \cdot \frac{\partial {}^e \tilde{X}_k(\zeta_b)}{\partial \zeta_j} = \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} \cdot {}^e J_{kj} \\ \delta_{ij} &= \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial \zeta_j} = \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} \cdot {}^e J_{kj} \Rightarrow \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} = ({}^e J_{ik})^{-1} = {}^e J_{ik}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-119})$$

gewonnen wird. D. h., die Ableitungen der transformierten Einheitskoordinaten nach den Ortskoordinaten X_i kann durch die bereits eingeführte Jakobimatrix ausgedrückt werden. Für die Inversion der Jakobimatrix kann auch eine Darstellung der Abhängigkeit von den Ortskoordinaten gefunden werden, woraus folgender Ausdruck resultiert:

$$\frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} = ({}^e J_{ik})^{-1} = {}^e J_{ik}^{-1} = {}^e \tilde{J}_{ik}^{-1}(\zeta_a) = {}^e \tilde{J}_{ik}^{-1}(\zeta_a({}^e X_b)) =: {}^e \hat{J}_{ik}^{-1}({}^e X_a) \quad (\text{Rel. 4-120})$$

Nun sind noch die zweiten partielle Ableitungen in (Rel. 4-120) umzuschreiben, welche aus der problembezogenen Tatsache resultieren, dass der Verzerrungsgradiententensor η_{ijk} auftritt. Hierfür zieht man die eben gewonnene Beziehung (Rel. 4-120)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} &= {}^e J_{ik}^{-1} = ({}^e J_{ik})^{-1} = \left[{}^e \hat{J}_{ik}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b)) \right]^{-1} = \left[{}^e \hat{J}_{ik}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b({}^e X_c))) \right]^{-1} \\ \frac{\partial \zeta_i({}^e X_a)}{\partial {}^e X_k} &= \left[{}^e \hat{J}_{ik}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b({}^e X_c))) \right]^{-1} = \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_i(\zeta_b)}{\partial \zeta_k} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-121})$$

heran und differenziert diese (Rel. 4-121) ein weiteres Mal nach den elementbezogenen Ortskoordinaten X_i , womit man den Term

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \zeta_i({}^e X_a)}{\partial {}^e X_l \partial {}^e X_k} &= \frac{\partial}{\partial {}^e X_l} \frac{\partial \zeta_i({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b))}{\partial {}^e X_k} = \frac{\partial}{\partial {}^e X_l} \left\{ \left[{}^e \hat{J}_{ik}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b({}^e X_c))) \right]^{-1} \right\} = \\ &= \frac{\partial \left[({}^e J_{ik})^{-1} \right]}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot \frac{\partial {}^e J_{uv}({}^e X_a)}{\partial {}^e X_l} = \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot \frac{\partial}{\partial {}^e X_l} \left[{}^e \hat{J}_{uv}({}^e \tilde{X}_a(\zeta_b({}^e X_c))) \right] \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-122})$$

Erhält. Er führt durch weitere Auswertung schließlich zum Ausdruck

$$\frac{\partial^2 \zeta_i({}^e X_a)}{\partial {}^e X_l \partial {}^e X_k} = \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot \frac{\partial}{\partial {}^e X_l} \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_u(\zeta_b({}^e X_c))}{\partial \zeta_v} \right] = \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot \frac{\partial^2 {}^e \tilde{X}_u(\zeta_b({}^e X_c))}{\partial \zeta_w \partial \zeta_v} \cdot \frac{\zeta_w({}^e X_c)}{\partial {}^e X_l} \quad (\text{Rel. 4-123})$$

Darin ist die Ableitung der Inversion der Funktionalmatrix enthalten, die man aus der Identität

$$\begin{aligned} {}^e J_{ik}^{-1} \cdot {}^e J_{kj} &= \delta_{ij} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial {}^e J_{uv}} ({}^e J_{ik}^{-1} \cdot {}^e J_{kj}) = 0_{ijuv} = \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot {}^e J_{kj} + {}^e J_{ik}^{-1} \cdot \frac{\partial {}^e J_{kj}}{\partial {}^e J_{uv}} \\ \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} \cdot {}^e J_{kj} &= -{}^e J_{ik}^{-1} \cdot \frac{\partial {}^e J_{kj}}{\partial {}^e J_{uv}} \Rightarrow \frac{\partial {}^e J_{ik}^{-1}}{\partial {}^e J_{uv}} = -{}^e J_{ik}^{-1} \cdot \delta_{ku} \cdot \delta_{jv} \cdot {}^e J_{jk} = -{}^e J_{iu}^{-1} \cdot {}^e J_{vk} \end{aligned} \quad (\text{Rel. 4-124})$$

bestimmen kann. Durch Rücksubstitution von (Rel. 4-119) und (Rel. 4-124) in (Rel. 4-123) lassen sich die zweiten partiellen Ableitungen der transformierten Einheitskoordinaten ζ_q nach den globalen Ortskoordinaten X_i mit

$$\frac{\partial^2 \zeta_i({}^e X_a)}{\partial {}^e X_l \partial {}^e X_k} = -{}^e J_{iu}^{-1} \cdot {}^e J_{vk} \cdot \frac{\partial^2 {}^e \tilde{X}_u(\zeta_b({}^e X_c))}{\partial \zeta_w \partial \zeta_v} \cdot {}^e J_{wl}^{-1} = -{}^e J_{iu}^{-1} \cdot {}^e J_{vk} \cdot {}^e I_{uvw} \cdot {}^e J_{wl}^{-1} \quad (\text{Rel. 4-125})$$

bestimmen, worin die Größe

$${}^e I_{uvw} := \frac{\partial^2 {}^e \tilde{X}_u(\zeta_b)}{\partial \zeta_w \partial \zeta_v} = \frac{\partial^2 {}^e \tilde{X}_u(\zeta_b)}{\partial \zeta_v \partial \zeta_w} = {}^e I_{uvw} \quad (\text{Rel. 4-126})$$

definierend eingeführt worden ist. Dadurch ist es möglich die Linearisierung des Verzerrungsgradiententensors $\Delta \eta_{ijk}$ (Rel. 4-117) in den Ausdruck

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \frac{\partial^2 {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{mi}^{-1} \cdot {}^e J_{lj}^{-1} - \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{lu}^{-1} \cdot {}^e J_{vj} \cdot {}^e I_{uvw} \cdot {}^e J_{wi}^{-1} \quad (\text{Rel. 4-127})$$

umzuformen, wobei dieser Term (Rel. 4-127) symbolisch nur mehr elementar ermittelbare Größen enthält.

Da der Linearisierungs- und Variationsoperator Richtungsableitungen darstellt und deshalb formal gesehen völlig analoge Definitionen aufweisen, ist die Struktur eines Ausdrucks, der entweder durch Linearisierung oder durch Variation aus ein- und demselben Term resultiert, identisch. Das bedeutet, dass bei Änderung der Operation bezüglich des gleichen Ausdrucks nur die entsprechenden Größen im Resultat vertauscht werden müssen. Folglich sind beim Übergang vom Linearisierungs- auf den Variationsoperator für denselben Ausgangsterm die Inkremente der unbekannten Größen durch die entsprechenden Testfunktionen im Ergebnisterm zu ersetzen. Auch bei der Umkehrung dieses Vorgangs kann man völlig analog vorgehen, indem man die Testfunktionen aus der Variation durch die Inkremente der unbekannten Größen bezüglich der Linearisierung ersetzt. Mit diesen elementaren, aber sehr nützlichen Tatsachen, reduzieren sich die Berechnungen zur ersten Variation der kinematischen Verzerrungsgrößen erheblich. Im Folgenden wird bei der Anwendung dieser Tatsache meist von der Operatoranalogie bzw. der Analogie der Operatoren gesprochen.

Bei Verwendung des Galerkin-Verfahrens, welches in dieser Arbeit zur Anwendung kommt, werden die gleichen Ansätze bezüglich der Testfunktionen wie bei den unbekannten ortsabhängigen Feldgrößen verwendet, wodurch schließlich auf Elementebene für die Gewichtsfunktionen der Ausdruck

$${}^e \xi_i := {}^e \tilde{\xi}_i(\zeta_q) := \sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}^e_I \xi_i \quad (\text{Rel. 4-128})$$

gesetzt werden kann. Dabei sind die Symbole ${}^e_I \xi_i$ beliebige reellwertige skalare Faktoren. Aus der Variation des Verzerrungsgradiententensors $\delta \eta_{ijk}$ kann auf Elementebene definitionsgemäß mit

$$\frac{\partial^2 {}^e \xi_k}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} = \delta \eta_{ijk} = \delta \hat{\eta}_{ijk}({}^e X_l) = \frac{\partial^2 {}^e \tilde{\xi}_k({}^e X_l)}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} = \frac{\partial^2 {}^e \tilde{\xi}_k({}^e \tilde{X}_l(\zeta_a))}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} = \frac{\partial^2 {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_a)}{\partial {}^e X_i \partial {}^e X_j} = \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_a) \quad (\text{Rel. 4-129})$$

angeschrieben werden, da dieser Ausdruck global auf dem Gebiet Gültigkeit besitzt, in dem die Feldgleichungen zu lösen sind. Aus der zuvor beschriebenen Operatoranalogie folgt sofort der Ausdruck für die Variation des Verzerrungsgradiententensors als Funktion der transformierten Raumkoordinaten ζ_a

$$\delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_a) = \frac{\partial^2 {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_a)}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{mi}^{-1} \cdot {}^e J_{lj}^{-1} - \frac{\partial {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_a)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{lu}^{-1} \cdot {}^e J_{vj} \cdot {}^e I_{uvw} \cdot {}^e J_{wi}^{-1} \quad (\text{Rel. 4-130})$$

Damit sind die Terme bezüglich der Theorie höherer Ordnung in eine für die FEM verwertbare Form gebracht, womit eine Basis zur Implementierung vorhanden ist. Auf die noch ausstehende Größe der Linearisierung des infinitesimalen Verzerrungstensors $\Delta \hat{\epsilon}_{lm}({}^e \hat{u}_s({}^e X_t))$ wird im Abschnitt 4.3.2.2 eingegangen.

4.3.2.1.1 Darstellung mittels Formfunktionen

Da im Rahmen der FEM im Allgemeinen ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen ist, bei dem die unbekannten Knotengrößen in einem iterativen Prozess zu berechnen sind, müssen diese in das Gesamtproblem eingearbeitet bzw. in die Formulierung mit aufgenommen werden. Dieser Sachverhalt wird im nachfolgenden kurz skizziert, wobei die Ansatzfunktionen in Gestalt der Linearkombination von Formfunktionen in den Ausdruck der Linearisierung des Verzerrungsgradiententensors eingesetzt werden. Dadurch erhält man aus (Rel. 4-127) den Term

$$\Delta \eta_{ijk} = \frac{\partial^2}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} [{}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)] \cdot {}^e J_{mi}^{-1} \cdot {}^e J_{lj}^{-1} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} [{}^e \Delta \tilde{u}_k(\zeta_q)] \cdot {}^e J_{lu}^{-1} \cdot {}^e J_{vj} \cdot {}^e I_{uvw} \cdot {}^e J_{wi}^{-1} \quad (\text{Rel. 4-131})$$

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \frac{\partial^2}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \left[\sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}^e_I \Delta u_k \right] \cdot {}^e A_{milj} - \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left[\sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_q) \cdot {}^e_I \Delta u_k \right] \cdot {}^e B_{lji}$$

worin die darin enthaltenen Substitutionen folgendermaßen definiert sind:

$$\begin{aligned}
 {}^e A_{milj} &:= {}^e \tilde{A}_{milj}(\zeta_b) := {}^e \tilde{J}_{mi}^{-1}(\zeta_c) \cdot {}^e \tilde{J}_{lj}^{-1}(\zeta_d) = {}^e J_{mi}^{-1} \cdot {}^e J_{lj}^{-1} \\
 {}^e B_{lji} &:= {}^e \tilde{B}_{lji}(\zeta_b) := {}^e \tilde{J}_{lu}^{-1}(\zeta_b) \cdot {}^e \tilde{J}_{vj}(\zeta_c) \cdot {}^e \tilde{I}_{uvw}(\zeta_d) \cdot {}^e \tilde{J}_{wi}^{-1}(\zeta_f) = \\
 &= {}^e J_{lu}^{-1} \cdot {}^e J_{vj} \cdot {}^e I_{uvw} \cdot {}^e J_{wi}^{-1}
 \end{aligned} \tag{Rel. 4-132}$$

Weitere Auswertung von (Rel. 4-131) durch Differentiation führt zu einem Ausdruck folgender Form

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \left(\sum_{l=1}^n \frac{\partial^2 N_l}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot {}^e_i \Delta u_k \right) \cdot {}^e A_{milj} - \left(\sum_{l=1}^n \frac{\partial N_l}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e_i \Delta u_k \right) \cdot {}^e B_{lji} \tag{Rel. 4-133}$$

Definiert man noch die zusätzlichen Substitutionen

$$\begin{aligned}
 N_{lml} &:= \tilde{N}_{lml}(\zeta_b) := \frac{\partial^2 \tilde{N}_l(\zeta_q)}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} = \frac{\partial^2 N_l}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \quad N_{ll} := \tilde{N}_{ll}(\zeta_b) := \frac{\partial \tilde{N}_l(\zeta_b)}{\partial \zeta_l} = \frac{\partial N_l}{\partial \zeta_l} \\
 {}^e O_{lij} &:= {}^e \tilde{O}_{lij}(\zeta_b) := \frac{\partial^2 \tilde{N}_l(\zeta_b)}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot {}^e \tilde{A}_{milj}(\zeta_c) = \tilde{N}_{lml}(\zeta_b) \cdot {}^e \tilde{A}_{milj}(\zeta_c) = N_{lml} \cdot {}^e A_{milj} \\
 {}^e Q_{lij} &:= {}^e \tilde{Q}_{lij}(\zeta_b) := \frac{\partial \tilde{N}_l(\zeta_b)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e \tilde{B}_{lji}(\zeta_c) = \tilde{N}_{ll}(\zeta_b) \cdot {}^e \tilde{B}_{lji}(\zeta_c) = N_{ll} \cdot {}^e B_{lji}
 \end{aligned} \tag{Rel. 4-134}$$

so können weitere Umformungen mit Einsetzen von (Rel. 4-132) und (Rel. 4-134) in (Rel. 4-133) durchgeführt werden, was zu den Ausdrücken

$$\begin{aligned}
 \Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) &= \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial^2 N_l}{\partial \zeta_m \partial \zeta_l} \cdot {}^e A_{milj} \cdot {}^e_i \Delta u_k \right) - \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial N_l}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e B_{lji} \cdot {}^e_i \Delta u_k \right) \\
 \Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) &= \sum_{l=1}^n [{}^e \tilde{O}_{lij}(\zeta_b) \cdot {}^e_i \Delta u_k] - \sum_{l=1}^n [{}^e \tilde{Q}_{lij}(\zeta_c) \cdot {}^e_i \Delta u_k]
 \end{aligned} \tag{Rel. 4-135}$$

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \sum_{l=1}^n \{ [{}^e \tilde{O}_{lij}(\zeta_b) - {}^e \tilde{Q}_{lij}(\zeta_c)] \cdot {}^e_i \Delta u_k \} = \sum_{l=1}^n [{}^e \tilde{V}_{lij}(\zeta_b) \cdot {}^e_i \Delta u_k]$$

führt, woraus letztendlich der Term

$$\Delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_q) = \sum_{l=1}^n {}^e O_{lij} \cdot {}^e_i \Delta u_k - \sum_{l=1}^n {}^e Q_{lij} \cdot {}^e_i \Delta u_k = \sum_{l=1}^n {}^e V_{lij} \cdot {}^e_i \Delta u_k = \Delta \eta_{ijk} \tag{Rel. 4-136}$$

mit

$${}^e V_{lij} := {}^e \tilde{V}_{lij}(\zeta_a) := {}^e \tilde{O}_{lij}(\zeta_a) - {}^e \tilde{Q}_{lij}(\zeta_b) = {}^e O_{lij} - {}^e Q_{lij} \tag{Rel. 4-137}$$

resultiert. Aufgrund der Tatsache, dass die Ansatzfunktionen bezüglich der Verschiebungssinkremente mit jenen der Gewichtsfunktionen formal übereinstimmen, kann aufgrund der Operatoranalogie für die Variation des Verzerrungsgradiententensors sofort der nachfolgende Ausdruck,

$$\begin{aligned}
 \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_a) &= \sum_{l=1}^n {}^e \tilde{O}_{lij}(\zeta_a) \cdot {}^e_i \xi_k - \sum_{l=1}^n {}^e \tilde{Q}_{lij}(\zeta_b) \cdot {}^e_i \xi_k = \\
 \delta \eta_{ijk} &= \sum_{l=1}^n {}^e O_{lij} \cdot {}^e_i \xi_k - \sum_{l=1}^n {}^e Q_{lij} \cdot {}^e_i \xi_k = \sum_{l=1}^n {}^e V_{lij} \cdot {}^e_i \xi_k = \sum_{l=1}^n {}^e V_{lij} \cdot {}^e_i \xi_k
 \end{aligned} \tag{Rel. 4-138}$$

basierend auf dem Ergebnis der Linearisierung (Rel. 4-136), angegeben werden.

4.3.2.2 Standardtheorie

Mit der analogen Begründung wie zu Beginn des Abschnitts 4.3.1 sind auf Elementebene Integralausdrücke auszuwerten, die kinematische Verzerrungsgrößen der Standardtheorie beinhalten. Mit denselben Ansatz- und Formfunktion sowie der gleichen Koordinatentransformation wie im Abschnitt 4.3.1 kann für die Linearisierung des linearen Verzerrungstensors $\Delta \hat{\varepsilon}_{lm} \left({}^e \hat{u}_s({}^e X_t) \right)$ der Ausdruck

$$\begin{aligned}\Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e u_a) &= \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial {}^e \Delta u_i}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \Delta u_j}{\partial {}^e x_i} \right) = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i({}^e x_v)}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_j({}^e x_w)}{\partial {}^e x_i} \right] = \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\tilde{x}_v(\zeta_a))}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_j(\tilde{x}_w(\zeta_b))}{\partial {}^e x_i} \right] = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\zeta_v)}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_j(\zeta_w)}{\partial {}^e x_i} \right]\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-139})$$

angegeben werden, woraus

$$\begin{aligned}\Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e u_a) &= \Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \hat{u}_a({}^e x_b)) = \Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \hat{u}_a(\tilde{x}_b(\zeta_c))) = \Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \tilde{u}_a(\zeta_b)) = \\ &= \Delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \tilde{u}_a(\hat{\zeta}_b({}^e x_c))) = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\hat{\zeta}_v({}^e x_a))}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_j(\hat{\zeta}_w({}^e x_b))}{\partial {}^e x_i} \right] = \Delta \hat{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a)\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-140})$$

folgt. Hierin (Rel. 4-140) ist wiederum der Term

$$\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\hat{\zeta}_v({}^e x_a))}{\partial {}^e x_j} = \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot \frac{\partial \hat{\zeta}_k({}^e x_a)}{\partial {}^e x_j} = \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot {}^e J_{kj}^{-1} \quad (\text{Rel. 4-141})$$

nach der Kettenregel zu differenzieren und auszuwerten, womit dann für die Linearisierung des infinitesimalen Verzerrungstensor der Ausdruck

$$\Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_i(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot {}^e J_{kj}^{-1} + \frac{\partial {}^e \Delta \tilde{u}_j(\zeta_w)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{li}^{-1} \right] \quad (\text{Rel. 4-142})$$

hervorgeht, und somit eine leicht zu bestimmende Darstellung zur Verfügung steht.

Die erste Variation des linearen Verzerrungstensors ist auf Elementebene mit der üblichen Argumentation durch

$$\begin{aligned}\delta \varepsilon_{ij} &= \delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e x_a) = \delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \tilde{x}_a(\zeta_b)) = \delta \hat{\varepsilon}_{ij}({}^e \tilde{x}_a(\hat{\zeta}_b({}^e x_c))) = \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_i(\hat{\zeta}_v({}^e x_a))}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_j(\hat{\zeta}_w({}^e x_b))}{\partial {}^e x_i} \right] = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_i(\zeta_v)}{\partial {}^e x_j} + \frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_j(\zeta_w)}{\partial {}^e x_i} \right] = \delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a)\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-143})$$

darstellbar, woraus mit denselben Ansätzen für die Gewichtsfunktionen wie im Abschnitt 4.3.1 und durch Anwendung der Operatoranalogie der Term

$$\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) = \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_i(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot {}^e J_{kj}^{-1} + \frac{\partial {}^e \tilde{\varepsilon}_j(\zeta_w)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e J_{li}^{-1} \right] \quad (\text{Rel. 4-144})$$

resultiert. Damit sind alle für die Implementierung im Rahmen der FEM notwendigen Ausdrücke bestimmt. Diese Terme müssen nur noch für explizite Form- bzw. Ansatzfunktionen ausgewertet, und in Matrix-Vektor Notation restrukturiert sowie dann in Programmcode umgesetzt werden.

4.3.2.2.1 Darstellung mittels Formfunktionen

Zum Aufstellen des Gesamtgleichungssystems im Rahmen der FEM werden die Formulierungen unter expliziter Miteinbeziehung einzelner Terme der Formfunktionsdarstellung aus den Anteilen der schwachen Form bezüglich der Standardtheorie reformuliert bzw. restrukturiert. Durch Einsetzen der Ansatzfunktionen erhält man für die Linearisierung des infinitesimalen Verzerrungstensors

$$\begin{aligned}\Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \zeta_k} \left({}^e \Delta \tilde{u}_i(\zeta_v) \right) \cdot {}^e J_{kj}^{-1} + \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left({}^e \Delta \tilde{u}_j(\zeta_w) \right) \cdot {}^e J_{li}^{-1} \right] \\ \Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \zeta_k} \left(\sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_v) \cdot {}^e_I \Delta u_i \right) \cdot {}^e J_{kj}^{-1} + \frac{\partial}{\partial \zeta_l} \left(\sum_{I=1}^n \tilde{N}_I(\zeta_w) \cdot {}^e_I \Delta u_j \right) \cdot {}^e J_{li}^{-1} \right]\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-145})$$

woraus durch Auswerten

$$\begin{aligned}\Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\left(\sum_{I=1}^n \frac{\partial \tilde{N}_I(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot {}^e_I \Delta u_i \right) \cdot {}^e J_{kj}^{-1} + \left(\sum_{I=1}^n \frac{\partial \tilde{N}_I(\zeta_w)}{\partial \zeta_l} \cdot {}^e_I \Delta u_j \right) \cdot {}^e J_{li}^{-1} \right] \\ \Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) &= \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{I=1}^n \tilde{N}_{Ik}(\zeta_v) \cdot {}^e J_{kj}^{-1} \cdot {}^e_I \Delta u_i + \sum_{I=1}^n \tilde{N}_{Il}(\zeta_w) \cdot {}^e J_{li}^{-1} \cdot {}^e_I \Delta u_j \right]\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-146})$$

und mit den Substitutionen

$$N_{Ik} := \tilde{N}_{Ik}(\zeta_a) := \frac{\partial \tilde{N}_I(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} = \frac{\partial N_I}{\partial \zeta_k} \quad (\text{Rel. 4-147})$$

$${}^e P_{Ij} := {}^e \tilde{P}_{Ij}(\zeta_a) := \tilde{N}_{Ik}(\zeta_v) \cdot {}^e \tilde{J}_{kj}^{-1}(\zeta_w) = N_{Ik} \cdot {}^e J_{kj}^{-1} = \frac{\partial \tilde{N}_I(\zeta_v)}{\partial \zeta_k} \cdot {}^e \tilde{J}_{kj}^{-1}(\zeta_w)$$

schließlich der Ausdruck

$$\Delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{l=1}^n {}^e \tilde{P}_{lj}(\zeta_a) \cdot {}^e_l \Delta u_l + \sum_{l=1}^n {}^e \tilde{P}_{li}(\zeta_a) \cdot {}^e_l \Delta u_l \right] \quad (\text{Rel. 4-148})$$

$$\Delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{l=1}^n {}^e P_{lj} \cdot {}^e_l \Delta u_l + \sum_{l=1}^n {}^e P_{li} \cdot {}^e_l \Delta u_l \right)$$

folgt. In gleicher Weise erhält man wegen Verwendung der völlig analogen Ansatz- bzw. Formfunktionen für die Variation des infinitesimalen Verzerrungstensors den äquivalenten Term

$$\delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_a) = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{l=1}^n {}^e \tilde{P}_{lj}(\zeta_a) \cdot {}^e_l \xi_l + \sum_{l=1}^n {}^e \tilde{P}_{li}(\zeta_a) \cdot {}^e_l \xi_l \right] \quad (\text{Rel. 4-149})$$

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{l=1}^n {}^e P_{lj} \cdot {}^e_l \xi_l + \sum_{l=1}^n {}^e P_{li} \cdot {}^e_l \xi_l \right)$$

welcher ebenso die eingeführten Tensoren P_{Ij} enthält.

4.4 Gesamtformulierung auf Elementebene zur allgemeinen softwaretechnischen Implementierung

Ziel dieses Abschnitt ist es, eine Darstellung für die Anteile der Steifigkeitsmatrizen bereitzustellen, die als Grundlage verwendet wird, um ein Element mit variabler Knotenanzahl für Lagrangesche Ansatzpolynome variablen Grades zu implementieren. Im numerischen Lösungsprozess der FEM werden Steifigkeits- bzw. Elementsteifigkeitsmatrizen benötigt. Die Anteile der Elementsteifigkeitsmatrizen sind Blockmatrizen, die wiederum aus den tensoriellen Verknüpfungen und Kontraktionen der Indizes durch Restrukturierung aufgebaut werden. Dadurch entsteht zwar bei symmetrischen Problemen mehr Rechenaufwand, da die symmetrischen Anteile bei den Indexoperationen ebenfalls mit berechnet werden. Hinzu kommt noch ein zusätzlicher Aufwand, der durch die Umstrukturierung der mehrstufigen Tensoren entsteht, wobei dieser in Relation zur numerischen Auswertung relativ gering ist. Auch der Performance-Nachteil bezüglich der symmetrischen Anteile ist gegenüber der einheitlichen Behandlungsweise von verschiedensten Elementen und der weiteren Verwendung der Indexnotation vertretbar. Die Verwendung der Indexnotation ist deshalb zu bevorzugen, da bei der Implementierung die Beziehungen aus der Herleitung direkt übernommen werden können, und nicht noch eine zusätzliche vorher durchzuführende symbolische Reformulierung auf Matrix-Vektor Notation (bspw. Voigt Notation) erfolgen muss, welche eine weitere Fehlerquelle darstellt.

4.4.1 Anteile aus erweiterter Theorie

Mittels Einsetzen der kinematischen Größen, welche im letzten Abschnitt 4.3 durch Linearkombinationen der Formfunktionen ausgedrückt worden sind, in die verschiedenen Anteile der schwachen Form, können die entsprechenden Einträge der Elementsteifigkeitsmatrizen gewonnen werden. Für den ersten Anteil bezüglich der erweiterten Theorie erhält man über (Rel. 4-111), (Rel. 4-138) und (Rel. 4-148) den Term

$$\Delta S^e = \int_{e\Omega} {}^e \tilde{C}_{ijklm}(\zeta_w) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{lm}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega$$

$$\Delta S^e = \int_{e\Omega} {}^e \tilde{C}_{ijklm} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_a \left({}^e \tilde{X}_b(\zeta_c) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_f(\zeta_h) \right) \right) \right) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{l=1}^n {}^e P_{lm} \cdot {}^e_l \Delta u_l + \sum_{l=1}^n {}^e P_{li} \cdot {}^e_l \Delta u_m \right) \cdot \sum_{j=1}^n {}^e V_{lij} \cdot {}^e_j \xi_k \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{st}(\zeta_u)] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-150})$$

aus dem durch Auswertung

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \varepsilon C_{ijklm} \cdot \left(\sum_{l=1}^n e P_{lm} \cdot e_l \Delta u_l \cdot \sum_{j=1}^n e V_{lij} \cdot e_j \xi_k + \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^n e P_{ll} \cdot e_l \Delta u_m \cdot \sum_{j=1}^n e V_{lij} \cdot e_j \xi_k \right) \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{st}(\zeta_u)] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-151})$$

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \varepsilon C_{ijklm} \cdot \left(\sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n e_j \xi_k \cdot e P_{lm} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_l + \right. \\ \left. + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n e_j \xi_k \cdot e P_{ll} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_m \right) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega$$

folgt. Weitere Umrechnungen führen zu

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n (e_j \xi_k \cdot e P_{lm} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_l + \\ + e_j \xi_k \cdot e P_{ll} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_m) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-152})$$

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \left(\int_{e_\Omega} e_j \xi_k \cdot e P_{lm} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_l \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega + \right. \\ \left. + \int_{e_\Omega} e_j \xi_k \cdot e P_{ll} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot e_l \Delta u_m \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \right)$$

woraus dann

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \left(e_j \xi_k \cdot \int_{e_\Omega} e P_{lm} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \cdot e_l \Delta u_l + \right. \\ \left. + e_j \xi_k \cdot \int_{e_\Omega} e P_{ll} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \cdot e_l \Delta u_m \right) \quad (\text{Rel. 4-153})$$

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n (e_j \xi_k \cdot {}^\varepsilon M_{kl}^{s_1} \cdot e_l \Delta u_l + e_j \xi_k \cdot {}^\varepsilon M_{km}^{s_2} \cdot e_l \Delta u_m)$$

mit

$${}^\varepsilon M_{kl}^{s_1} := \int_{e_\Omega} e P_{lm} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-154}) \\ {}^\varepsilon M_{km}^{s_2} := \int_{e_\Omega} e P_{ll} \cdot \varepsilon C_{ijklm} \cdot e V_{lij} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega$$

resultiert. Durch Umbenennung der stummen Summationsindizes kann schließlich der endgültige Anteil der Elementsteifigkeitsmatrix durch den Ausdruck

$$\Delta s^\varepsilon = \frac{1}{2} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n (e_j \xi_i \cdot {}^\varepsilon M_{ij}^{s_1} \cdot e_l \Delta u_j + e_j \xi_i \cdot {}^\varepsilon M_{ij}^{s_2} \cdot e_l \Delta u_j) \quad (\text{Rel. 4-155}) \\ \Delta s^\varepsilon = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n e_j \xi_i \cdot \frac{1}{2} \cdot ({}^\varepsilon M_{ij}^{s_1} + {}^\varepsilon M_{ij}^{s_2}) \cdot e_l \Delta u_j = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n e_j \xi_i \cdot {}^\varepsilon M_{ij}^s \cdot e_l \Delta u_j$$

mit Hilfe der Blocktensoren

$${}^\varepsilon M_{ij}^s = \frac{1}{2} \cdot ({}^\varepsilon M_{ij}^{s_1} + {}^\varepsilon M_{ij}^{s_2}) \quad (\text{Rel. 4-156})$$

dargestellt werden.

Für die Bestimmung der Elementsteifigkeitsmatrix für den zweiten Anteil der schwachen Form bezüglich der erweiterten Theorie geht man analog vor. Durch Einsetzen der Ansatzfunktionen (Rel. 4-136) und (Rel. 4-138) in (Rel. 4-111) erhält man

$$\Delta s^\eta = \int_{e_\Omega} {}^\eta \tilde{C}_{abcpqr}(\zeta_v) \cdot \Delta \tilde{\eta}_{pqr}(\zeta_w) \cdot \delta \tilde{\eta}_{abc}(\zeta_z) \cdot \det \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_s(\zeta_u)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega$$

$$\Delta s^\eta = \int_{e_\Omega} {}^\eta \tilde{C}_{abcpqr} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e \hat{u}_g \left({}^e \tilde{X}_m(\zeta_n) \right) \right) \right) \cdot$$

$$\cdot \sum_{I=1}^{e_n} {}^e V_{Ipq} \cdot {}^e \Delta u_r \cdot \sum_{J=1}^{e_n} {}^e V_{Jab} \cdot {}^e j_{\xi c} \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{st}(\zeta_u)] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-157})$$

woraus durch Auswerten die Ausdrücke

$$\Delta s^\eta = \int_{e_\Omega} {}^\eta C_{abcpqr} \cdot \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} {}^e j_{\xi c} \cdot {}^e V_{Ipq} \cdot {}^e V_{Jab} \cdot {}^e \Delta u_r \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega$$

$$\Delta s^\eta = \int_{e_\Omega} \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} {}^e j_{\xi c} \cdot {}^e V_{Ipq} \cdot {}^\eta C_{abcpqr} \cdot {}^e V_{Jab} \cdot {}^e \Delta u_r \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-158})$$

$$\Delta s^\eta = \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} \int_{e_\Omega} {}^e j_{\xi c} \cdot {}^e V_{Ipq} \cdot {}^\eta C_{abcpqr} \cdot {}^e V_{Jab} \cdot {}^e \Delta u_r \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega$$

folgen und somit schließlich die Terme

$$\Delta s^\eta = \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} {}^e j_{\xi c} \cdot \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ipq} \cdot {}^\eta C_{abcpqr} \cdot {}^e V_{Jab} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \cdot {}^e \Delta u_r$$

$$\Delta s^\eta = \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} {}^e j_{\xi c} \cdot {}^\eta M_{cr}^s \cdot {}^e \Delta u_r = \sum_{J=1}^{e_n} \sum_{I=1}^{e_n} {}^e j_{\xi i} \cdot {}^\eta M_{ij}^s \cdot {}^e \Delta u_j \quad (\text{Rel. 4-159})$$

gewonnen werden können, wobei die Blocktensoren durch

$${}^\eta M_{ij}^s = \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ipq} \cdot {}^\eta C_{abipqj} \cdot {}^e V_{Jab} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-160})$$

definiert sind.

Als nächstes muss noch das absolute Glied der Taylorreihe für den Anteil der schwachen Form bezüglich der Spannungen höherer Ordnung bestimmt werden, welche die rechte Seite des iterativ zu lösenden Gleichungssystems darstellt. Dieses absolute Glied (Rel. 4-86) setzt sich aus drei Teilen zusammen. Der erste Teil bezieht sich dabei auf die Spannungen höherer Ordnung, der zweite und dritte Teil berücksichtigt die Randbedingungen der erweiterten Theorie. Da die beiden letztgenannten Terme physikalisch schwer interpretierbar und experimentell kaum faßbar sind, werden diese hier getrennt behandelt. Für den ersten Teil von (Rel. 4-86) gilt auf Elementebene der Ausdruck

$${}_s p = \int_{e_V} \tau_{ijk} \cdot \delta \eta_{ijk} dV = \int_{e_\Omega} \tilde{\tau}_{ijk}(\zeta_g) \cdot \delta \tilde{\eta}_{ijk}(\zeta_h) \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{yz}(\zeta_r)] d\Omega$$

$${}_s p = \int_{e_\Omega} \hat{\tau}_{ijk} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e \hat{u}_g \left({}^e \tilde{X}_m(\zeta_n) \right) \right) \right) \cdot$$

$$\cdot \sum_{J=1}^{e_n} {}^e V_{Jij} \cdot {}^e j_{\xi k} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-161})$$

$${}_s p = \int_{e_\Omega} \tau_{ijk} \cdot \sum_{J=1}^{e_n} {}^e V_{Jij} \cdot {}^e j_{\xi k} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega$$

$${}_s p = \sum_{J=1}^{e_n} \int_{e_\Omega} \tau_{ijk} \cdot {}^e V_{Jij} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \cdot {}^e j_{\xi k}$$

woraus dann

$${}_s p = \sum_{J=1}^{e_n} {}^e V_{Jk}^s \cdot {}^e j_{\xi k} \quad \text{mit} \quad {}^e V_{Jk}^s := \int_{e_\Omega} \tau_{ijk} \cdot {}^e V_{Jij} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-162})$$

folgt.

Für die Spannungsrandbedingungen aus (Rel. 4-86) ergibt sich der zweite Teil auf Elementebene

$$\frac{\partial}{\partial} p = \int_{\partial e_V} \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot \delta u_k dA = \int_{\partial e_V} \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot {}^e \xi_k dA = \int_{\partial e_V} \frac{\partial}{\partial} \hat{\tau}_k({}^e X_a) \cdot {}^e \xi_k({}^e X_b) dA$$

$$\frac{\partial}{\partial} s = \int_{\partial e_V} \frac{\partial}{\partial} \hat{\tau}_k \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_r) \right) \cdot {}^e \xi_k \left({}^e \tilde{X}_b(\zeta_s) \right) dA =: \frac{\partial}{\partial} \hat{p} \left({}^e \tilde{X}_c(\zeta_t) \right) =: \frac{\partial}{\partial} \hat{p}({}^e X_c) \quad (\text{Rel. 4-163})$$

$$\frac{\partial}{\partial} s = \int_{\partial e_V} \frac{\partial}{\partial} \tilde{\tau}_k(\zeta_r) \cdot {}^e \xi_k(\zeta_s) dA =: \frac{\partial}{\partial} \hat{p}(\zeta_c)$$

Hierin ist die Größe $\frac{\partial}{\partial} \tau_k$ als erweiterte, vorgegebene und somit bekannte Randbedingung anzusehen, um das Feldproblem eindeutig zu beschreiben. Durch die Umformung in transformierte Koordinaten erhält man den Term

$$\frac{\partial}{\partial} p = \frac{\partial}{\partial} \hat{p}(\zeta_c) = \int_{\partial e_\Omega} \frac{\partial}{\partial} \tilde{\tau}_k(\zeta_a) \cdot {}^e \xi_k(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_v(\zeta_c)}{\partial \zeta_w} \right] d\phi \quad (\text{Rel. 4-164})$$

$$\frac{\partial}{\partial} s = \int_{\partial e_\Omega} \frac{\partial}{\partial} \tilde{\tau}_k(\zeta_a) \cdot {}^e \xi_k(\zeta_b) \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{vw}(\zeta_r)] d\phi = \int_{\partial e_\Omega} \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot {}^e \xi_k \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi$$

aus dem durch Einsetzen der Ansatzfunktionen für die Gewichtsfunktionen (Rel. 4-128) die Ausdrücke

$$\frac{\partial}{\partial} p = \int_{\partial e_\Omega} \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot \sum_{J=1}^n N_J \cdot {}^e \xi_k \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \quad (\text{Rel. 4-165})$$

$$\frac{\partial}{\partial} s = \sum_{J=1}^n \int_{\partial e_\Omega} N_J \cdot \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \cdot {}^e \xi_k$$

und

$$\frac{\partial}{\partial} s = \sum_{J=1}^n \frac{\partial}{\partial} R_k^s \cdot {}^e \xi_k \quad \text{mit} \quad \frac{\partial}{\partial} R_k^s := \int_{\partial e_\Omega} N_J \cdot \frac{\partial}{\partial} \tau_k \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \quad (\text{Rel. 4-166})$$

folgen. Damit sind die vorzugebenden skalaren Koeffizienten $\frac{\partial}{\partial} \tau_k$, welche die zusätzlichen höheren Randlasten repräsentieren, in das Problem eingebaut.

Für den dritten Teil aus (Rel. 4-86) gilt durch Einsetzen auf Elementebene

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_V} n \tau_{ik} \cdot \delta H_{ki} dA = \int_{\partial e_V} n \tau_{ik} \cdot \frac{\partial {}^e \xi_k}{\partial X_i} dA = \int_{\partial e_V} n \tau_{ik}({}^e X_a) \cdot \frac{\partial {}^e \xi_k({}^e X_b)}{\partial X_i} dA$$

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_V} n \hat{\tau}_{ik} \left({}^e \tilde{X}_a(\zeta_s) \right) \cdot \frac{\partial {}^e \hat{\xi}_k \left({}^e \tilde{X}_b(\zeta_t) \right)}{\partial X_i} dA =: \frac{n}{s} \hat{p} \left({}^e \tilde{X}_c(\zeta_z) \right) =: \frac{n}{s} \hat{p}({}^e X_c) \quad (\text{Rel. 4-167})$$

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_V} n \tilde{\tau}_{ik}(\zeta_a) \cdot \frac{\partial {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_b)}{\partial X_i} dA =: \frac{n}{s} \tilde{p}(\zeta_c)$$

woraus der Ausdruck

$$\frac{n}{s} p = \frac{n}{s} \tilde{p}(\zeta_c) = \int_{\partial e_\Omega} n \tilde{\tau}_{ik}(\zeta_a) \cdot \frac{\partial {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_b)}{\partial X_i} \cdot \det \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_v(\zeta_c)}{\partial \zeta_w} \right] d\phi \quad (\text{Rel. 4-168})$$

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_\Omega} n \tilde{\tau}_{ik}(\zeta_a) \cdot \frac{\partial {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_b)}{\partial X_i} \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{vw}(\zeta_c)] d\phi = \int_{\partial e_\Omega} n \tau_{ik} \cdot \frac{\partial {}^e \xi_k}{\partial X_i} \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi$$

folgt. Mittels Substitution der Gewichtsfunktionen aus (Rel. 4-128) resultiert der Term

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_\Omega} n \tau_{ik} \cdot \frac{\partial}{\partial X_i} \left[\sum_{J=1}^n \tilde{N}_J(\zeta_a) \cdot {}^e \xi_k \right] \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi$$

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_\Omega} n \tau_{ik} \cdot \left[\sum_{J=1}^n \frac{\partial \tilde{N}_J(\zeta_a({}^e X_b))}{\partial X_i} \cdot {}^e \xi_k \right] \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \quad (\text{Rel. 4-169})$$

$$\frac{n}{s} p = \int_{\partial e_\Omega} n \tau_{ik} \cdot \left[\sum_{J=1}^n \frac{\partial \tilde{N}_J(\zeta_a)}{\partial \zeta_j} \cdot \frac{\partial \zeta_j({}^e X_b)}{\partial X_i} \cdot {}^e \xi_k \right] \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi$$

welcher schließlich mit den Substitutionen (Rel. 4-147) zu

$$\begin{aligned}
{}^n p &= \int_{\partial} {}^e \Omega {}^n \tau_{ik} \cdot \left[\sum_{j=1}^n \tilde{N}_{Jj}(\zeta_a) \cdot {}^e \tilde{f}_{ji}^{-1}(\zeta_b) \cdot {}^e \xi_k \right] \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \\
{}^n p &= \int_{\partial} {}^e \Omega {}^n \tau_{ik} \cdot \left(\sum_{j=1}^n {}^e \tilde{P}_{ji}(\zeta_a) \cdot {}^e \xi_k \right) \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \quad (\text{Rel. 4-170}) \\
{}^n p &= \sum_{j=1}^n \int_{\partial} {}^e \Omega {}^n \tau_{ik} \cdot {}^e P_{ji} \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \cdot {}^e \xi_k = \sum_{j=1}^n {}^n R_k^s \cdot {}^e \xi_k
\end{aligned}$$

umformuliert werden kann, wobei die folgenden Abkürzungen eingeführt wurden:

$${}^n p = \sum_{j=1}^n {}^n R_k^s \cdot {}^e \xi_k \quad \text{mit} \quad {}^n R_k^s = \int_{\partial} {}^e \Omega {}^n \tau_{ik} \cdot {}^e P_{ji} \cdot \det({}^e J_{vw}) d\phi \quad (\text{Rel. 4-171})$$

Damit sind die zur Generierung und Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems erforderlichen Blocktensoren zweiter und erster Stufe für die erweiterte Theorie bestimmt, und es kann zur Standardtheorie übergegangen werden.

4.4.2 Anteile aus Standardtheorie

Das Vorgehen für diesen Anteil entspricht dem aus dem letzten Abschnitt, ist jedoch aufgrund der Differentiationsordnung weniger komplex. Setzt man die durch die Formfunktionen ausgedrückten Größen (Rel. 4-148) und (Rel. 4-149) in den Anteil der linearisierten schwachen Form (Rel. 4-111) bezüglich der Standardtheorie ein, so erhält man den Term

$$\begin{aligned}
\Delta g &= \int {}^e \Omega \tilde{D}_{ijkl}(\zeta_a) \cdot \Delta \tilde{\varepsilon}_{kl}(\zeta_a) \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{{}^e \tilde{X}_s(\zeta_c)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega \\
\Delta g &= \int {}^e \Omega \hat{D}_{ijkl} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right) \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{l=1}^n {}^e P_{ll} \cdot {}^e_l \Delta u_k + \sum_{l=1}^n {}^e P_{lk} \cdot {}^e_l \Delta u_l \right) \cdot \\
&\quad \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{j=1}^n {}^e P_{jj} \cdot {}^e_j \xi_i + \sum_{j=1}^n {}^e P_{ji} \cdot {}^e_j \xi_j \right) \cdot \det[{}^e \tilde{f}_{st}(\zeta_a)] d\Omega \quad (\text{Rel. 4-172})
\end{aligned}$$

woraus durch Auswertung der Ausdruck

$$\begin{aligned}
\Delta g &= \frac{1}{4} \cdot \int {}^e \Omega D_{ijkl} \cdot \left(\sum_{l=1}^n {}^e P_{ll} \cdot {}^e_l \Delta u_k \cdot \sum_{j=1}^n {}^e P_{jj} \cdot {}^e_j \xi_i + \sum_{l=1}^n {}^e P_{ll} \cdot {}^e_l \Delta u_k \cdot \sum_{j=1}^n {}^e P_{ji} \cdot {}^e_j \xi_j \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l=1}^n {}^e P_{lk} \cdot {}^e_l \Delta u_l \cdot \sum_{j=1}^n {}^e P_{jj} \cdot {}^e_j \xi_i + \sum_{l=1}^n {}^e P_{lk} \cdot {}^e_l \Delta u_l \cdot \sum_{j=1}^n {}^e P_{ji} \cdot {}^e_j \xi_j \right) \cdot \det({}^e J_{st}) d\Omega \quad (\text{Rel. 4-173}) \\
\Delta g &= \frac{1}{4} \cdot \int {}^e \Omega D_{ijkl} \cdot \left(\sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{ll} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_k + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{ll} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_k \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{lk} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_l + \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{lk} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_l \right) \cdot \det({}^e J_{st}) d\Omega
\end{aligned}$$

folgt. Durch weitere Umrechnungen resultieren die Beziehungen

$$\begin{aligned}
\Delta g &= \frac{1}{4} \cdot \int {}^e \Omega \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n ({}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{ll} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_k + {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{ll} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_k + \\
&\quad + {}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_l + {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_l) \cdot \det({}^e J_{st}) d\Omega \quad (\text{Rel. 4-174}) \\
\Delta g &= \frac{1}{4} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \int {}^e \Omega ({}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{ll} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_k + {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{ll} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_k + \\
&\quad + {}^e_j \xi_i \cdot {}^e P_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{jj} \cdot {}^e_l \Delta u_l + {}^e_j \xi_j \cdot {}^e P_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^e P_{ji} \cdot {}^e_l \Delta u_l) \cdot \det({}^e J_{st}) d\Omega
\end{aligned}$$

Aufgrund der Tatsache, dass die frei wählbaren Koeffizienten ${}^e_j \xi_a$ sowie die unbekannten skalaren Größen ${}^e_l \Delta u_b$ unabhängig von den Integrationsvariablen sind, können die Substitutionen

$${}_{IJ}M_{ik}^{g_1} := \int_{e_\Omega} {}^eP_{il} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^eP_{jj} \cdot \det({}^eJ_{st}) d\Omega$$

$${}_{IJ}M_{jk}^{g_2} := \int_{e_\Omega} {}^eP_{il} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^eP_{ji} \cdot \det({}^eJ_{st}) d\Omega$$

$${}_{IJ}M_{il}^{g_3} := \int_{e_\Omega} {}^eP_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^eP_{jj} \cdot \det({}^eJ_{st}) d\Omega$$

$${}_{IJ}M_{jl}^{g_4} := \int_{e_\Omega} {}^eP_{lk} \cdot D_{ijkl} \cdot {}^eP_{ji} \cdot \det({}^eJ_{st}) d\Omega$$

(Rel. 4-175)

eingeführt werden, womit der Ausdruck folgendermaßen darstellbar ist:

$$\begin{aligned} \Delta g = \frac{1}{4} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \left({}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ik}^{g_1} \cdot {}^e\Delta u_k + {}^e\xi_j \cdot {}_{IJ}M_{jk}^{g_2} \cdot {}^e\Delta u_k + \right. \\ \left. + {}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{il}^{g_3} \cdot {}^e\Delta u_l + {}^e\xi_j \cdot {}_{IJ}M_{jl}^{g_4} \cdot {}^e\Delta u_l \right) \end{aligned}$$

(Rel. 4-176)

Durch Umbenennung der stummen Indizes geht hieraus der Term

$$\begin{aligned} \Delta g = \frac{1}{4} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \left({}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ij}^{g_1} \cdot {}^e\Delta u_j + {}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ij}^{g_2} \cdot {}^e\Delta u_j + \right. \\ \left. + {}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ij}^{g_3} \cdot {}^e\Delta u_j + {}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ij}^{g_4} \cdot {}^e\Delta u_j \right) \end{aligned}$$

(Rel. 4-177)

$$\Delta g = \frac{1}{4} \cdot \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e\xi_i \cdot \left({}_{IJ}M_{ij}^{g_1} \cdot {}^e\Delta u_j + {}_{IJ}M_{ij}^{g_2} + {}_{IJ}M_{ij}^{g_3} + {}_{IJ}M_{ij}^{g_4} \right) \cdot {}^e\Delta u_j$$

hervor, der dann endgültig mit

$${}_{IJ}M_{ij}^g := \frac{1}{4} \cdot \left({}_{IJ}M_{ij}^{g_1} + {}_{IJ}M_{ij}^{g_2} + {}_{IJ}M_{ij}^{g_3} + {}_{IJ}M_{ij}^{g_4} \right)$$

(Rel. 4-178)

in verkürzter Form folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$\Delta g = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n {}^e\xi_i \cdot {}_{IJ}M_{ij}^g \cdot {}^e\Delta u_j$$

(Rel. 4-179)

Auch für den Anteil der schwachen Form (Rel. 4-43) bezüglich der Standardtheorie muss noch das absolute Glied der Taylorreihe berechnet werden, welches sich hier aus zwei Teilen zusammensetzt. Für den ersten Teil, der sich auf die Spannungen bezieht und durch ein Volumenintegral bestimmt ist, ergibt sich aus der schwachen Form auf Elementebene der Ausdruck

$${}^V_g p := \int_{e_V} \sigma_{ik} \cdot \delta \varepsilon_{ik} dV = \int_{e_\Omega} \tilde{\sigma}_{ik}(\zeta_g) \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ik}(\zeta_h) \cdot \det[{}^eJ_{yz}(\zeta_r)] d\Omega$$

$${}^V_{sp} = \int_{e_\Omega} \hat{\sigma}_{ik} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e\hat{u}_d \left({}^e\tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e\hat{u}_g \left({}^e\tilde{X}_m(\zeta_n) \right) \right) \right) \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{j=1}^n {}^eP_{jk} \cdot {}^e\xi_i + {}^eP_{ji} \cdot {}^e\xi_k \right) \cdot \det[{}^eJ_{yz}] d\Omega$$

(Rel. 4-180)

$${}^V_{sp} = \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \left(\sum_{j=1}^n {}^eP_{jk} \cdot \sigma_{ik} \cdot {}^e\xi_i + {}^eP_{ji} \cdot \sigma_{ik} \cdot {}^e\xi_k \right) \cdot \det[{}^eJ_{yz}] d\Omega$$

wodurch man mit der Symmetrie des Cauchyschen Spannungstensors den Term

$$\begin{aligned}
{}_g^V p &= \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \left(\sum_{j=1}^{e_n} {}^e P_{jk} \cdot \sigma_{ik} \cdot {}^e j \xi_i + \sum_{j=1}^{e_n} {}^e P_{ji} \cdot \sigma_{ik} \cdot {}^e j \xi_k \right) \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \\
{}_g^V p &= \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{j=1}^{e_n} \int_{e_\Omega} {}^e P_{jk} \cdot \sigma_{ik} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \cdot {}^e j \xi_i + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{j=1}^{e_n} \int_{e_\Omega} {}^e P_{ji} \cdot \sigma_{ik} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega \cdot {}^e j \xi_k \right]
\end{aligned} \tag{Rel. 4-181}$$

$${}_g^V p = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_{j=1}^{e_n} {}^V R_i^g \cdot {}^e j \xi_i + \sum_{j=1}^{e_n} {}^V P_k^g \cdot {}^e j \xi_k \right] = \sum_{j=1}^{e_n} {}^V R_i^g \cdot {}^e j \xi_i$$

mit

$${}^V R_i^g := \int_{e_\Omega} {}^e P_{jk} \cdot \sigma_{ik} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega = \int_{e_\Omega} {}^e P_{ji} \cdot \sigma_{ik} \cdot \det[{}^e J_{yz}] d\Omega = {}^V R_k^g \tag{Rel. 4-182}$$

erhält.

Nun ist noch der Anteil aus den vorgegebenen Randspannungen zu bestimmen, der sich aus einem Oberflächenintegral in (Rel. 4-43) berechnen lässt. Durch Einsetzen in den Anteil der schwachen Form bezüglich der Standardtheorie erhält man auf Elementebene für den zweiten Teil

$$\begin{aligned}
{}_g^N p &:= \int_{\partial e_V} {}^n \sigma_k \cdot {}^e \xi_k dA = \int_{\partial e_V} {}^n \sigma_k \cdot \delta {}^e u_k dA \\
{}_s^N p &= \int_{\partial e_\Omega} {}^n \tilde{\sigma}_k(\zeta_g) \cdot \delta {}^e \tilde{u}_k(\zeta_h) \cdot \det \left[\frac{\partial {}^e \tilde{X}_v(\zeta_r)}{\partial \zeta_w} \right] d\phi =: {}_g^N \hat{p} \left({}^e \tilde{X}_c(\zeta_t) \right) =: {}_g^N \hat{p}({}^e X_c) \\
{}_s^N p &= \int_{\partial e_\Omega} {}^n \hat{\sigma}_k \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e \hat{u}_g \left({}^e \tilde{X}_m(\zeta_n) \right) \right) \right) \cdot \\
&\quad \cdot {}^e \tilde{\xi}_k(\zeta_s) \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{vw}(\zeta_r)] d\phi =: {}_g^N \tilde{p}(\zeta_c)
\end{aligned} \tag{Rel. 4-183}$$

der sich in Abhängigkeit von den transformierten Einheitskoordinaten darstellen lässt. Die Substitution für die Gewichtsfunktionen aus (Rel. 4-128) führt mit weiteren Umformungen und Abkürzungen schließlich auf den Ausdruck

$$\begin{aligned}
{}_s^N p &= {}_g^N \tilde{p}(\zeta_c) = \int_{\partial e_\Omega} {}^n \tilde{\sigma}_k(\zeta_t) \cdot \sum_{N=1}^{e_n} \tilde{N}_j(\zeta_s) \cdot {}^e j \xi_k \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{vw}(\zeta_r)] d\phi \\
{}_s^N p &= \sum_{j=1}^{e_n} \int_{\partial e_\Omega} N_j \cdot {}^n \sigma_k \cdot \det[{}^e J_{vw}] d\phi \cdot {}^e j \xi_k \\
{}_s^N p &= \sum_{j=1}^{e_n} {}^N R_k^g \cdot {}^e j \xi_k \Leftrightarrow {}^N R_k^g := \int_{\partial e_\Omega} N_j \cdot {}^n \sigma_k \cdot \det[{}^e J_{vw}] d\phi
\end{aligned} \tag{Rel. 4-184}$$

Damit sind auch die zur Generierung und Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems notwendigen Anteile der Blocktensoren zweiter und erster Stufe bestimmt, die sich aus der Standardtheorie ergeben.

4.4.2.1 Spezielle Behandlung bei erweiterter Abhängigkeit von Termen höherer Ordnung

In der hier verwendeten „Mechanism based Strain Gradient Theory“ (vgl. Abschnitt 3.3) weist das Konstitutivgesetz (Rel. 3-124) in Bezug auf den (deviatorischen) Cauchyschen Spannungstensor σ_{ij} keine Abhängigkeiten vom Verzerrungsgradiententensor η_{ijk} auf. Deshalb treten diesbezüglich auch keine zusätzlichen Anteile bei der Linearisierung des Standardanteils auf, welche im Rahmen der allgemeinen Elementformulierung berücksichtigt werden müssten. Für den Fall einer solchen Abhängigkeit von η_{ijk} würde jedoch ein weiterer Teil bei der Umsetzung im Rahmen der FEM-Elementformulierung hinzukommen, dessen Behandlung im nachfolgenden kurz beschrieben wird bzw. der Vollständigkeit halber exemplarisch Berücksichtigung finden soll.

Grundsätzlich kann bei der Behandlung einer zusätzlichen Abhängigkeit des Konstitutivgesetzes vom Verzerrungsgradiententensor η_{ijk} analog zu den Abschnitten 4.4.1 bzw. 4.4.2 vorgegangen werden. Deshalb bestimmt man in äquivalenter Weise die Elementsteifigkeitsmatrix für den zweiten Anteil der schwachen Form bezüglich der Standardtheorie unter der Benutzung der bewährten Notation. Für die-

sen Anteil erhält man nach den Ausführungen in den Abschnitten 4.1.3 und 4.1.4 sowie 4.2.2 folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned}\Delta \bar{g} &= \int_{e_\Omega} \widetilde{\bar{D}}_{ijklm}(\zeta_a) \cdot \Delta \tilde{\eta}_{klm}(\zeta_a) \cdot \delta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\zeta_b) \cdot \det \left[\frac{{}^e \tilde{X}_s(\zeta_c)}{\partial \zeta_t} \right] d\Omega \\ \Delta \bar{g} &= \int_{e_\Omega} \widehat{\bar{D}}_{ijklm} \left(\hat{\varepsilon}_{vw} \left({}^e \hat{u}_d \left({}^e \tilde{X}_h(\zeta_f) \right) \right), \hat{\eta}_{rst} \left({}^e \hat{u}_g \left({}^e \tilde{X}_o(\zeta_n) \right) \right) \right) \cdot \\ &\quad \cdot \sum_{I=1}^n {}^e V_{Ikl} \cdot {}^e \Delta u_m \cdot \frac{1}{2} \cdot \left(\sum_{J=1}^n {}^e P_{Jj} \cdot {}^e \xi_i + \sum_{J=1}^n {}^e P_{Ji} \cdot {}^e \xi_j \right) \cdot \det[{}^e \tilde{J}_{st}(\zeta_a)] d\Omega\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-185})$$

woraus dann die Terme

$$\begin{aligned}\Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \bar{D}_{ijklm} \cdot \left(\sum_{I=1}^n {}^e V_{Ikl} \cdot {}^e \Delta u_m \cdot \sum_{J=1}^n {}^e P_{Jj} \cdot {}^e \xi_i + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{I=1}^n {}^e V_{Ikl} \cdot {}^e \Delta u_m \cdot \sum_{J=1}^n {}^e P_{Ji} \cdot {}^e \xi_j \right) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \\ \Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \bar{D}_{ijkl} \cdot \left(\sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n {}^e \xi_i \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot {}^e P_{Jj} \cdot {}^e \Delta u_m + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n {}^e \xi_j \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot {}^e P_{Ji} \cdot {}^e \Delta u_m \right) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-186})$$

resultieren. Hiermit sind durch weitere Umformungen wie in den vorigen Abschnitten die Ausdrücke

$$\begin{aligned}\Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \int_{e_\Omega} \left(\sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n {}^e \xi_i \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Jj} \cdot {}^e \Delta u_m + \right. \\ &\quad \left. + {}^e \xi_j \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Ji} \cdot {}^e \Delta u_m \right) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \\ \Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n \left(\int_{e_\Omega} {}^e \xi_i \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Jj} \cdot {}^e \Delta u_m + \right. \\ &\quad \left. + {}^e \xi_j \cdot {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Ji} \cdot {}^e \Delta u_m \right) \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-187})$$

bestimmbar, aus denen man dann die Terme

$$\begin{aligned}\Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n \left({}^e \xi_i \cdot \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Jj} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \cdot {}^e \Delta u_m + \right. \\ &\quad \left. + {}^e \xi_j \cdot \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Ji} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \cdot {}^e \Delta u_m \right) \\ \Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n \left({}^e \xi_i \cdot {}_{IJ} \bar{M}_{im}^{g_1} \cdot {}^e \Delta u_m + {}^e \xi_j \cdot {}_{IJ} \bar{M}_{jm}^{g_2} \cdot {}^e \Delta u_m \right)\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-188})$$

erhält. Für die Substitutionen werden analog zu den vorigen Abschnitten Blocktensoren definiert:

$$\begin{aligned}{}_{IJ} \bar{M}_{im}^{g_1} &:= \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Jj} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega \\ {}_{IJ} \bar{M}_{jm}^{g_2} &:= \int_{e_\Omega} {}^e V_{Ikl} \cdot \bar{D}_{ijklm} \cdot {}^e P_{Ji} \cdot \det[{}^e J_{st}] d\Omega\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-189})$$

Schließlich ist aus (Rel. 4-189) die endgültige Form bestimmbar die sich zu den Ausdrücken

$$\begin{aligned}\Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n \left({}^e \xi_i \cdot {}_{IJ} \bar{M}_{ij}^{g_1} \cdot {}^e \Delta u_j + {}^e \xi_i \cdot {}_{IJ} \bar{M}_{ij}^{g_2} \cdot {}^e \Delta u_j \right) \\ \Delta \bar{g} &= \frac{1}{2} \cdot \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n {}^e \xi_i \cdot \left({}_{IJ} \bar{M}_{ij}^{g_1} + {}_{IJ} \bar{M}_{ij}^{g_2} \right) \cdot {}^e \Delta u_j = \sum_{J=1}^n \sum_{I=1}^n {}^e \xi_i \cdot {}_{IJ} \bar{M}_{ij}^g \cdot {}^e \Delta u_j\end{aligned}\quad (\text{Rel. 4-190})$$

mit

$${}_{IJ}\bar{M}_{ij}^g := \frac{1}{2} \cdot \left({}_{IJ}\bar{M}_{ij}^{g_1} + {}_{IJ}\bar{M}_{ij}^{g_2} \right) \quad (\text{Rel. 4-191})$$

ergibt.

Damit sind alle Besonderheiten die bei der Implementierung eines Elements im Rahmen der FEM zu berücksichtigen sind im Detail erläutert, und es stehen sämtliche notwendigen Größen für die softwaretechnische Umsetzung zur Verfügung.

5 Anwendungen, Ergebnisse und Beispiele

Aufbauend auf den Erkenntnissen und Besonderheiten bei der Implementierung eines von Verzerungsgradienten abhängigen Materialmodells wurde ein Element für das kommerzielle FEM Softwarepaket ABAQUS (Abaqus User Subroutines / Reference Manual v6.10-1, 2010) entwickelt. Um Verzerungsgradienten überhaupt abbilden zu können, müssen mindestens zweifach differenzierbare Ansatz- bzw. Formfunktionen im Element enthalten sein. Zwecks flexibler Approximation gegebener Geometrien ist ein 10 Knoten Tetraederelement implementiert worden. Das Verschiebungsfeld wurde mit quadratischen Ansätzen und unter Einbeziehung der in Abschnitt 4 dargestellten Methoden abgebildet. Ein weiterer Grund für die Wahl eines 10-knotigen Tetraederlements liegt in der sehr freien Erstellung der Diskretisierung von dreidimensionalen Strukturen. Hierfür gibt es eine Vielzahl von Netzgeneratoren, welche automatisch in der Lage sind ein räumliches Gebiet in hochwertiger Güte durch Tetraederelemente abzubilden. Aus den in Abschnitt 3 vorgestellten Gradientenmodellen, wurde das Konstitutivgesetz nach dem Ansatz der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ implementiert. Das Element ist im Rahmen eines impliziten Lösungsverfahrens innerhalb der FEM implementiert worden (ABAQUS Standard), weshalb auf eine vollständige und exakte analytische Bestimmung der Steifigkeitsmatrizen besonderen Wert gelegt wurde, um damit bessere Konvergenzeigenschaften zu gewährleisten. Die notwendigen makroskopischen Fließspannungen wie bspw. Kupfer, Silber, usw. wurden aus der Literatur (Hinkfoth, 2003) entnommen und auf die Deformationstheorie angepasst. Da es sich gezeigt hat, dass die Größe der Mesozelle bzw. des repräsentativen Volumenmodells (RVE), welche durch den Skalierungsparameter β determiniert ist, keinen signifikanten Einfluss auf das Materialverhalten hat, wurde diese Größe für alle Beispiele auf den Wert 10 gesetzt.

5.1 Verifikation Plastizitätsmodell

Um die Implementierung des komplexen Modells zu verifizieren, wurden numerische Simulationen durchgeführt, die anschließend mit analytischen Lösungen aus der Literatur verglichen wurden (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999). Das Hauptproblem bei der numerischen Umsetzung bestand primär darin, dass mechanisch ideale Belastungszustände wie reine Biegung oder reine Torsion nur mit zusätzlichen Zwangs- bzw. Nebenbedingungen in einem vollständigen 3D FE-Modell darstellbar sind.

Als erstes Beispiel wurde die reine Biegung unterschiedlich dünner Kupferbalken untersucht. Die Dicke der Balken wurde dabei mit 200nm, 400nm und 600nm angenommen. Der Taylorfaktor für die Versetzungsbewegung ist mit 1.1 festgelegt, womit eher einkristallines Verhalten abgebildet wird.

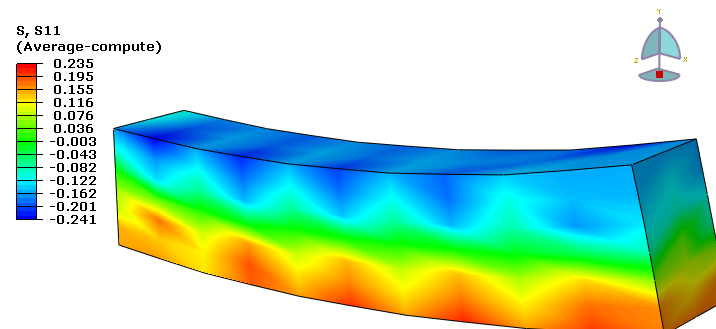


Bild 5-1: Normalspannungsverteilung in axialer Richtung für Biegebalken mit 400nm Dicke

Ein Problem bei der reinen Biegung von Balken liegt in der Festlegung der Randbedingungen. So wurden die Verschiebungsfreiheitsgrade in der Symmetrieebene nur in axialer Richtung gesperrt (im Bild 5-1 links), wohingegen diese sich normal zur Achsrichtung frei bewegen können. Am anderen Ende des Balkens (im Bild 5-1 rechts) wurde die äußere Last in Form einer Verdrehung der Querschnittsebene aufgebracht. Dabei mussten alle Knoten während der Deformation durch eine Zwangsbedingung in dieser Ebene bleiben, konnten sich aber ansonsten innerhalb dieser Fläche frei bewegen.

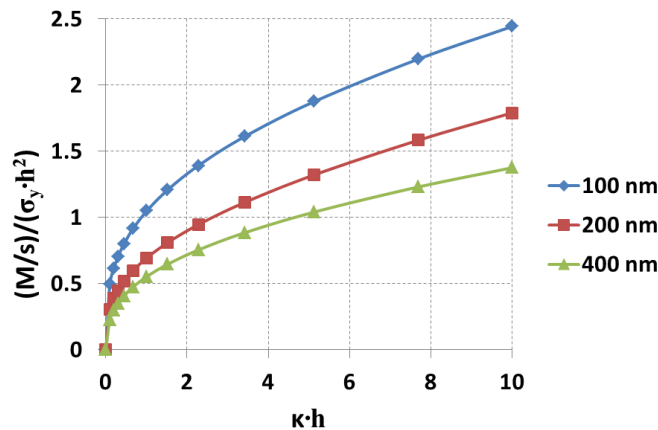


Bild 5-2: Skaleneffekt dünner Biegebalken bei normiertem Biegemoment unter normierter vorgegebener Krümmung

Wird das durch die Verdrehung des Querschnitts resultierende Reaktionsmoment M auf die Balkenstärke s bezogen und diese Größe auf das Produkt zwischen der Anfangsfließspannung σ_y und dem Quadrat der Balkenhöhe h^2 bezogen, so repräsentiert dieser Ausdruck eine normierte dimensionslose Belastung. In analoger Weise ist die mit der Balkenhöhe multiplizierte Krümmung eine dimensionslose Deformation. Werden diese Größen in einem Diagramm aufgetragen und für verschiedenen Balkenhöhen verglichen (Bild 5-2), so ist der Skaleneffekt deutlich zu erkennen. Ein Vergleich dieser Ergebnisse mit analytischen Untersuchungen (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999) zeigt eine gute Übereinstimmung und ist eine erste Verifikation der fehlerfreien Implementierung des Konstitutivmodells.

Um das Konstitutivgesetz sowie dessen Implementierung zusätzlich zu verifizieren wurde ein weiterer Anwendungsfall genauer untersucht. Hierfür wurde aus der begrenzten Zahl von experimentellen Untersuchungen (Fleck, Muller, Ashby, & Hutchinson, 1994) und analytischen Lösungen (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999) die Torsion dünner metallischer Drähte herangezogen.

Wie die reine Biegung, ist die reine Verdrehung dünner Drähte im Rahmen eines 3D FEM-Modells mit zehnknotigen Tetraederelementen etwas aufwendiger umzusetzen. Obwohl es sich bei der reinen Torsion um ein ebenes Problem handelt, wurde dieses trotzdem für die Verifikation der 3D Elemente herangezogen. Aufgrund der axialsymmetrischen Struktur der reinen Verdrehung musste zu diesem Zweck nur ein Kreissegment mit einer ausreichenden axialen Länge modelliert werden (Bild 5-3). Am unteren Ende der Querschnittsfläche dieses prismatischen Körpers werden die Freiheitsgrade in axialer und radialer Richtung gesperrt, wohingegen an der gegenüberliegenden oberen Querschnittsfläche nur die Verdrehwinkel bezüglich der Mittelachse vorgegeben wurden. An den rechteckförmigen axialen Seitenflächen des Zylindersegments wurden zyklische Randbedingungen in radialer Richtung angebracht, welche die Radialsymmetrie des Gesamtproblems abbilden.

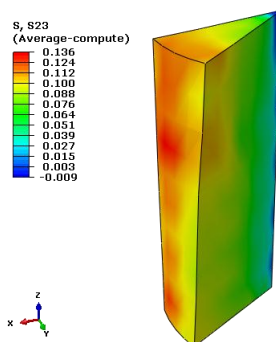


Bild 5-3: Schubspannungsverteilung in Querschnittsfläche für zylindrischen Draht mit einem Radius von 300nm

Im Bild 5-3 ist eine linear von innen nach außen ansteigende Schubspannungsverteilung durch die vorhandene Farbskalierung gut erkennbar, was die Gültigkeit des verwendeten Ansatzes zur numerischen Behandlung der reinen Torsion im Rahmen der 3D FEM nachweist.

Bild 5-4 zeigt in normierter, dimensionsloser Form den Zusammenhang zwischen Belastung und Verdrehung.

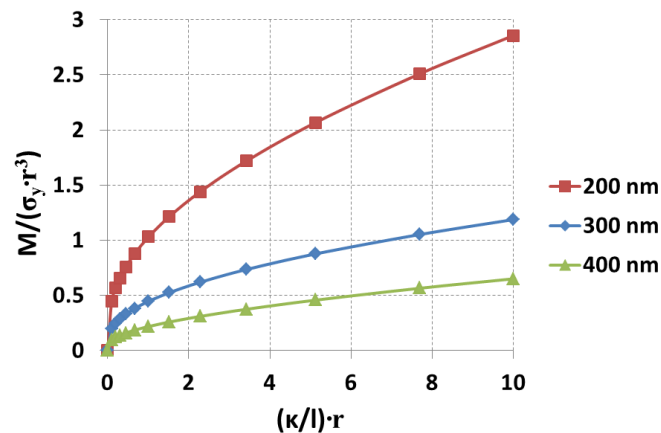


Bild 5-4: Skaleneffekt dünner Drähte bei normiertem Torsionsmoment unter normierter vorgegebener Verdrehung

Es ist gut zu erkennen, dass dünnere Kupferdrähte signifikant höhere auf die Radien normierte Torsionsmomente aufweisen als dickere. Das Gesamttorsionsmoment M wurde dabei auf das Produkt zwischen der Ausgangsfließspannung σ_y und der dritten Potenz des Radius r bezogen, woraus die vergleichbare dimensionslose Belastungsgröße der Ordinate resultiert. Auf der Abszisse ist die dimensionslose Deformationsgröße aufgetragen, welche sich aus dem Quotienten der Gesamtverdrehung κ und der Drahtlänge l ergibt, der multiplikativ mit dem Radius r verknüpft ist. Auch in diesem Belastungsfall zeigen sich gute Übereinstimmungen mit analytischen Lösungen (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999) die im Rahmen der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ durchgeführt wurden.

5.2 Nanoindentation

Eine in der Praxis wichtige Anwendung ist die sogenannte Nanoindentation. Diese stellt ein Prüfverfahren dar, das der experimentellen Ermittlung der Härte eines Werkstoffes auf der makroskopischen Skala entspricht. Bei diesem Verfahren wird ein harter Prüfkörper in die Oberfläche einer weichen zu prüfenden Probe eingedrückt. Das Eindringen des Prüfkörpers wird üblicherweise so lange fortgesetzt bis plastische Deformationen im Bereich der Kontaktzone auftreten. In diesem Zusammenhang kann die klassische Härte als eine Größe definiert werden, bei der die während der Indentation maximal auftretende Kraft F auf die Fläche A bezogen wird, welche durch den verbleibenden plastischen Eindruck entsteht. Der aus diesen beiden Größen abgeleitete Quotient, wird als Härte H bezeichnet und quantifiziert als wichtiger technischer Parameter lokale Eigenschaften des Werkstoffs. Die Kontur des plastischen Eindrucks ist offensichtlich stark von der Form des gewählten Prüfkörpers abhängig.

Der hauptsächliche Unterschied zwischen der Nanoindentation und der Makrohärteprüfung besteht darin, dass sich der an der Probenoberfläche lokal plastisch deformierte Bereich nicht mehr mit klassischen optischen Verfahren vermessen lässt, was exemplarisch im Bild 5-4 dargestellt ist.

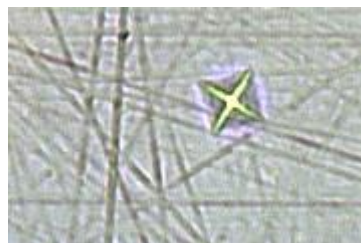


Bild 5-5: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme eines deformierten Bereichs nach einer Nanoindentation (Fischer-Cripps, 2011)

Ein weiterer wesentlicher Unterschied besteht in der simultanen Aufzeichnung der Kraft und der Penetrationstiefe. Dieser Verlauf wird bei Makrohärteprüfverfahren laut Norm nicht gespeichert, sondern es wird nur die maximale Kraft registriert. Bei der Nanoindentation müssen dagegen beide Größen kontinuierlich als Funktion der Zeit gespeichert werden, wobei als Material der Prüfkörper fast ausschließlich Diamanten Verwendung finden.

Als Prüfkörper kommen bei der Nanoindentation wie in der Makrohärteprüfung ähnliche Geometrien zur Anwendung. Die wichtigsten geometrischen Formen der Prüfkörper sind:

- I. **Pyramidale Geometrie:** Hierbei werden hauptsächlich der sogenannte Vickers-Indenter, welcher aus vier Seitenflächen besteht, und der ebenso weit verbreitete Berkovic-Indenter, welcher aus nur drei Seitenflächen besteht, verwendet. Für die genauen Geometrieparameter sei auf die entsprechende Norm ISO 14577 1-3 verwiesen, mit der die Nanoindentation seit 2002 vereinheitlicht worden ist.
- II. **Kugelförmige Geometrie:** Diese Prüfkörperform kommt im makroskopischen Bereich in der Härteprüfung nach Brinell zum Einsatz, wird aber auch auf der Skala der Nanoindentation verwendet, wobei hier die Norm keine Vorgaben macht.
- III. **Kegelige Geometrie:** In seltenen Fällen werden auch Kegel als Prüfkörper verwendet, wobei auch hier in der Norm keine genauen Angaben zu finden sind.

Welche Prüfkörpergeometrie in der Praxis verwendet wird, hängt vom Anwendungsfall und den vorhandenen experimentellen Möglichkeiten ab, wobei die Vergleichbarkeit der Messungen nicht unbedingt gegeben ist. Hinsichtlich des Vergleichs von Messungen unterschiedlicher Prüfkörperformen kann dabei auf das Ähnlichkeitsprinzip von Kick (Kick, 1885) zurückgegriffen werden, das besagt, dass Härtewerte nur dann verglichen werden können, wenn das Volumen des deformierten Materials und die Spannungsfelder während des Eindrucks in Bezug auf die Eindringtiefe ähnlich sind (Bild 5-6). Dieses Prinzip wird von Indentern mit Pyramidengeometrie erfüllt, von kugelförmigen Prüfkörpern jedoch nicht.

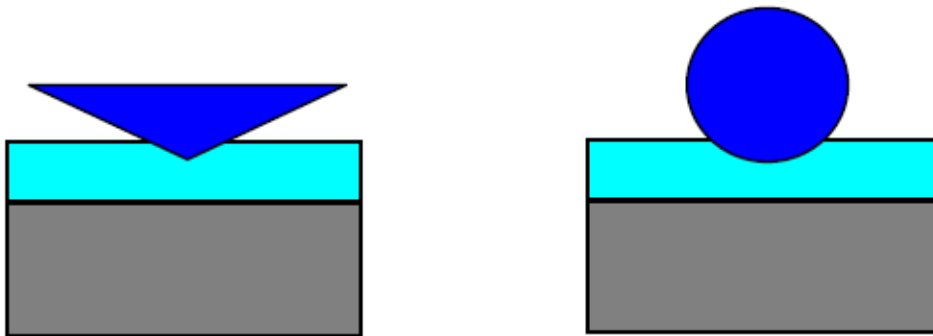


Bild 5-6: Ähnlichkeitsprinzip nach Kick: bei Pyramide erfüllt (links), bei Kugel nicht erfüllt (rechts)

Die Härte ist nur dann eine von den Messgrößen Last F und Eindringtiefe h unabhängige Materialgröße, wenn entsprechend dem KICKschen Ähnlichkeitsprinzip (Kick, 1885) zu jedem Zeitpunkt des Kontaktes zwischen Indenter und Material während des Belastungsvorgangs

$$F \propto h^2 \quad (\text{Rel. 5-1})$$

gilt. Schon mit dem konventionellen Messverfahren auf der Makroskala wurde jedoch eine – wenn auch nur sehr geringe – Abhängigkeit der Härtewerte von der Last und mithin von der Eindringtiefe unabhängig von der Geometrie des Indenters festgestellt. Diese Härtezunahme mit kleiner werdender Eindruckdimension wurde in Analogie zu anderen Gebieten der Physik als Maßstabs- bzw. Skaleneffekt angesehen, für den sich die Bezeichnung „Indentation Size Effect“ (ISE) (Sargent, 1986) einbürgerte. Die Ursachen des ISE wurden unter anderem mit Eigenschaften in Verbindung gebracht, deren Einfluss sich mit der Eindruckgröße ändert, wie es z.B. bei Schicht-Substrat- bzw. Korn-Matrix-Härteunterschieden der Fall ist.

Bei vielen kristallinen Materialien beruht die Härtezunahme („Indentation Size Effect“) auf materialabhängigen Skaleneffekten. Theoretische Betrachtungen (Nix & Gao, 1998) konnten die experimentell gefundene Tiefenabhängigkeit der Härte auf die Dichte von geometrisch notwendigen Versetzungen zurückführen, wobei viele Fragen auf diesem Gebiet noch nicht geklärt sind.

Hauptanwendung der Nanoindentation sind vor allem die Charakterisierung dünner meist metallischer Schichten (Bild 5-7 links) oder Multilayersysteme, aber auch die lokale Ermittlung von Eigenschaften in Mehrphasensystemen, deren einzelne Bereiche räumlich sehr nahe beieinander liegen (Bild 5-7 rechts).

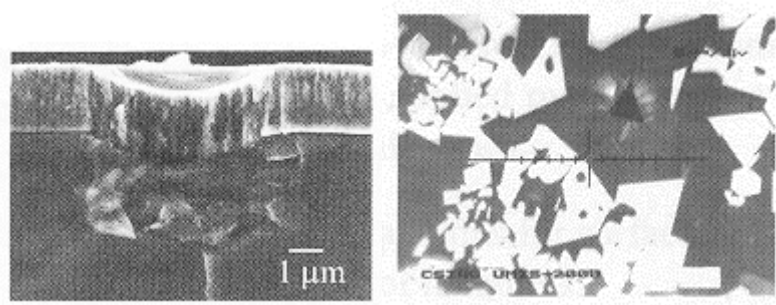


Bild 5-7: Anwendungsbeispiele der Nanoindentation (Fischer-Cripps, 2011): Querschnitt einer TiN Schicht auf Si Substrat, die durch kugeligen Indenter gezielt geschädigt wurde (links); Indentation des Matrixmaterials einer Sinterstahlprobe (rechts)

Als Ausgangspunkt für die Berechnung von Härte aber auch elastischem Modul dienen sogenannte „load-displacement-curves“ (Kraft-Weg-Diagramme, siehe Bild 5-8 links). In der Praxis werden auswertbare Versuche bis zu Eindringtiefen von nur 10 nm durchgeführt, wobei diese untere Grenze allerdings stark von der Rauigkeit der Probenoberfläche abhängt. Es können lokale mechanische Eigenschaften von Probenvolumina im Submikrometer- und Nanometerbereich gemessen werden. Ein verbreitetes Anwendungsgebiet der Nanoindentierung ist – wie bereits erwähnt – die mechanische Charakterisierung von dünnen Schichten, da hier sehr kleine Eindringtiefen erforderlich sind, um den Einfluss des Grundmaterials (Substrats) auf die Messergebnisse zu vermeiden.

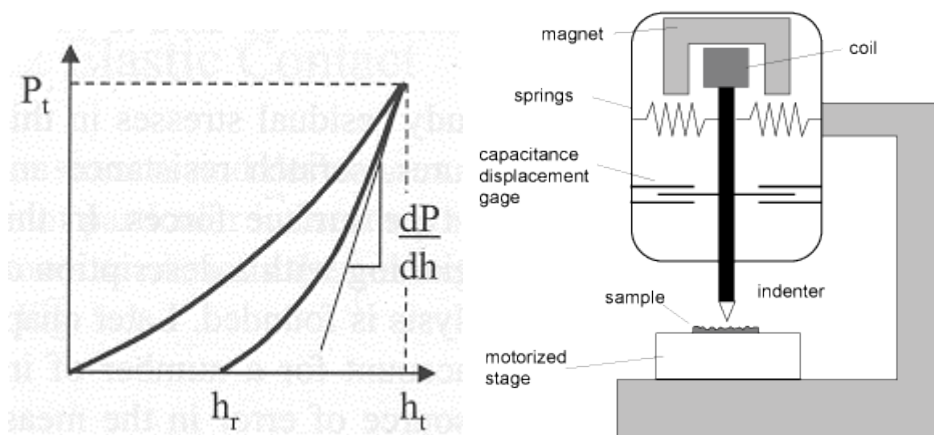


Bild 5-8: Nanoindentationsexperiment (Fischer-Cripps, 2011): Gemessene Kraft-Weg-Kurve (links); schematischer Versuchsaufbau (rechts)

Seit geraumer Zeit werden Nanoindentationsgeräte kommerziell angeboten, welche Nanoindentation mit Rasterkraftmikroskopie kombinieren, indem ein Nanoindenteraufsatz auf dem Scannerkopf eines Rasterkraftmikroskops montiert wird. Die Messspitze dient dabei sowohl zur Indentation als auch zur Abbildung der Oberflächentopographie einer Probe. Gelingt es, durch geeignete Probenpräparation eine Topographie zu erzeugen, die die Mikro- und Nanostruktur des Materialgefüges gut widerspiegelt, ermöglicht dies eine Positionierung und Durchführung des jeweiligen Indentationsversuchs in einzelnen Gefügebestandteilen, Fasern, Phasen, Körnern, Ausscheidungen etc. mit einer Ausdehnung von nur wenigen hundert Nanometern. Die Positioniergenauigkeit beträgt dabei 20 nm. Der Aufbau eines einfachen kommerziellen Nanoindentationsgeräts ist in Bild 5-8 rechts prinzipiell dargestellt.

Die zur Indentation aufzubringenden Kräfte werden meist induktiv erzeugt, wobei die präzise Führung des den Indenter tragenden Dorns schwierig ist. Durch den Dorn sollen keine zusätzlichen Kräfte in das System eingebracht werden, weil sich die Indentationslast ohnehin schon auf sehr niedrigem Niveau befindet. Hierfür kommen meist ausgeklügelte Federsysteme zum Einsatz. Der Indentieraufsatz ist im Wesentlichen ein Dreiplattenkondensator (Mitte von Bild 5-8 rechts). Das Anlegen einer elektrischen Spannung an den zwei äußeren Platten bewirkt eine elektrostatische Kraft auf die mittlere Platte, auf der ein Stift mit der Indenterspitze montiert ist. Die Verschiebung der mittleren Platte hat eine Kapazitätsänderung zur Folge, die, entsprechend kalibriert, als Maß für den Eindringweg der Spitze genutzt wird. Die Messauflösung für die Kraft ist deutlich besser als 1 μN , der Weg kann genauer als 0,1 nm er-

fasst werden. Unmittelbar nach erfolgtem Indentationsexperiment kann die Probenoberfläche mit den produzierten Härteeindrücken abgebildet werden

Zunehmend spielt die Nanoindentation auch in der Biomechanik (Oyen, 2010) eine wichtige Rolle, da viele biologische Phänomene auf physikalische Erklärungsmodelle zurückzuführen sind, die wiederum auf heterogenen lokalen Materialeigenschaften kleinster Bereiche basieren. In diesem Zusammenhang sei der Härteverlauf des Zahnschmelzes (Bild 5-9 links) erwähnt, welcher sich durch Substanzen bei kosmetisch bzw. ästhetischen (bspw. bleaching, withening, etc.) Methoden verändern kann.

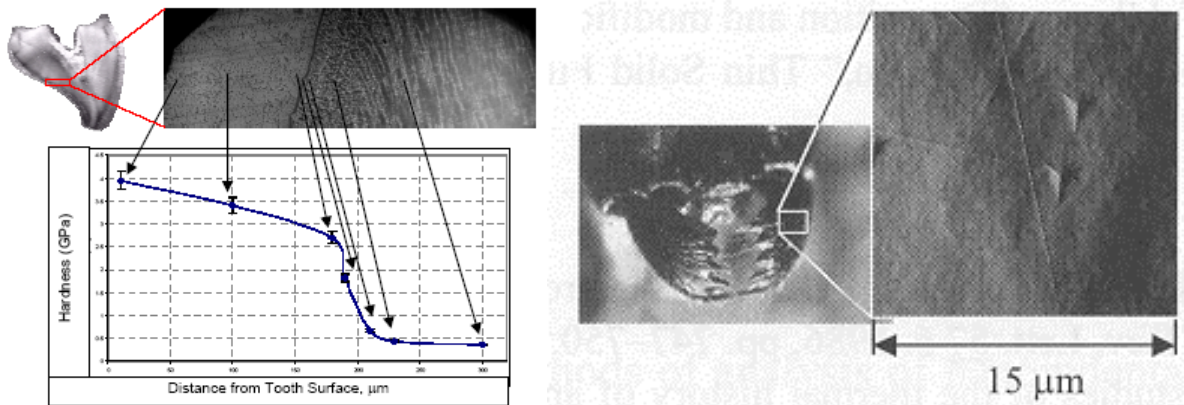


Bild 5-9: Nanoindentation biologischer Systeme (Oyen, 2010):

Härteverlauf an menschlichen Schneidezahn (links) und Härtemessung an Ameisenkiefer (rechts), (Fischer-Cripps, 2011)

Aber auch Untersuchungen zur Quantifizierung von Eigenschaften verschiedener Biomaterialien an bspw. kleinsten Insekten stellen ein wichtiges Anwendungsgebiet dar. Viele evolutionär entwickelte Materialien sind hocheffizient und können für technologische Anwendungen adaptiert werden.

Ein Ziel dieser Arbeit ist es, das skalenabhängige Materialverhalten zu modellieren. Dieser Skaleneffekt manifestiert sich im Wesentlichen durch die sich unterschiedlich einstellenden Kraftniveaus bei der Indentation verschieden dünner metallischer Schichten auf keramischen Substraten, aber auch in Form des bereits erwähnten „Indentation Size Effects“. Beobachtbar ist die Eigenschaft allerdings nur dann, wenn die äußeren geometrischen Bauteilabmessungen der untersuchten Strukturen Größenordnungen aufweisen, die mit denen der räumlichen Ausdehnungen des mikrostrukturellen Aufbaus des Werkstoffs vergleichbar sind. Somit kann der Effekt bei dünnen metallischen Schichten erst dann beobachtet werden, wenn die Stärke des metallischen Films so klein ist, dass nur mehr einige wenige Körner in Dickenrichtung vorhanden sind. Dementsprechend sind auch in dieser Arbeit Kraftverläufe mit höherem Niveau für dünnere Schichten gemessen worden. Die Herstellung der Proben (siehe Bild 5-10) für die Eindruckexperimente erfolgte mittels Molekularstrahlepitaxie am Fachgebiet für dünne Schichten des Fachbereichs Materialwissenschaften der TU Darmstadt. Dort wurden auch die Kupferproben in Hinblick auf Verteilungen von Größe und Orientierung der Körner mit entsprechenden Verfahren charakterisiert. Konkret wurden Proben mit Kupferschichtdicken von 100, 200, 400 und 600nm auf Siliziumsubstraten mit einer Stärke von ca. 0,5mm hergestellt.

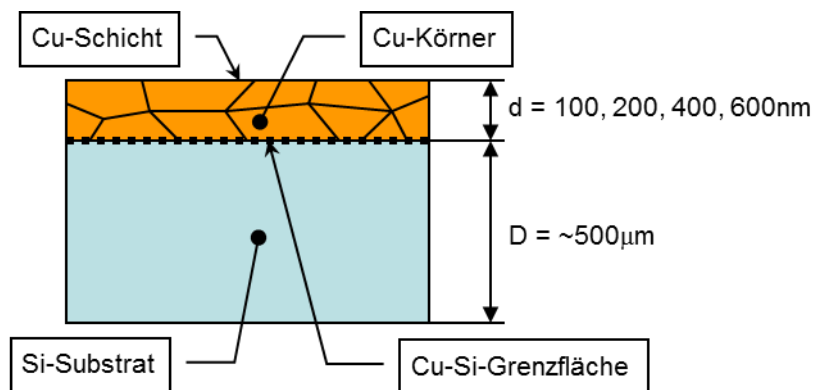


Bild 5-10: Schematischer Probenaufbau der untersuchten Schichtstruktur

Mit der Durchführung der Indentationsexperimente wurde das Forschungszentrum Karlsruhe betraut, deren Arbeitsgruppe international anerkannte Kompetenzen auf diesen Gebiet besitzt (Huber, Nix, & Gao, 2002), (Huber, Tsagrakis, & Tsakmakis, 2000), wobei dort auch rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von einigen Proben zur weiteren Charakterisierung gemacht wurden.

Im Folgenden werden die wesentlichen Gegebenheiten und einige ausgewählte Ergebnisse dieser experimentellen Untersuchungen dargestellt. Als Indenter wurde ein pyramidenförmiger Prüfkörper mit Vickersgeometrie verwendet. Der Diamantprüfkörper wurde durch Vorgabe einer linearen Verschiebungsfunktion kontinuierlich in die Kupferdünnschichtproben eingedrückt. Die erwähnte Abnahme der Härte mit steigender Indentationstiefe („Indentation Size Effect“, siehe Bild 5-11 rechts), wurde dabei gut nachgewiesen. Die steifer werdenden Eigenschaften der dünneren Kupferschichten sind durch ein höheres Niveau der Kraft-Verschiebungskurven (siehe Bild 5-11 links) in signifikanter Weise zu erkennen.

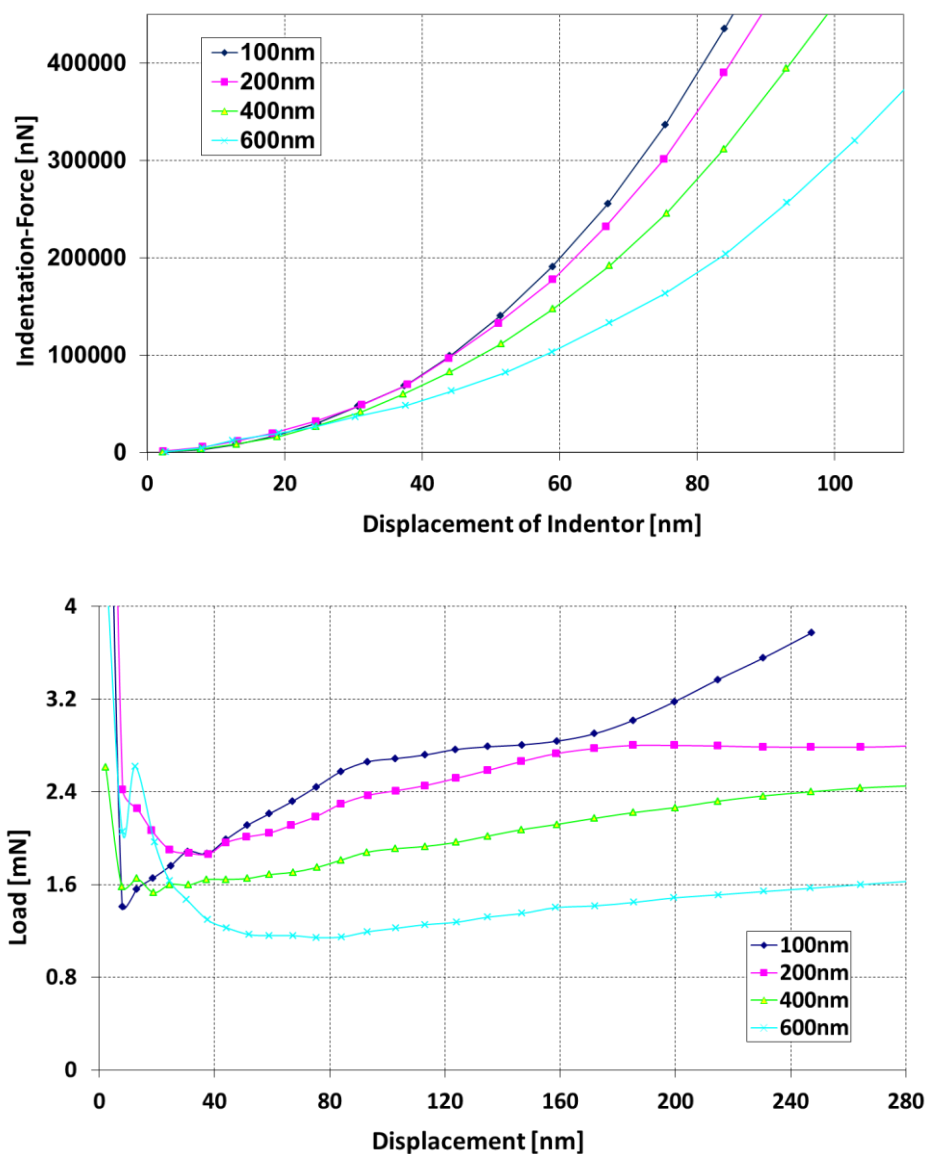


Bild 5-11: Experimentelle Ergebnisse zur Nanoidentation von Cu-Si System:
Kraft-Verschiebungskurve (oben); Härteverlauf mit „Indentation Size Effect“ (unten)

Aus den Aufnahmen der Rasterelektronenmikroskopie (siehe Bild 5-12) folgt, dass charakteristische Kornabmessungen in Größenordnungen von einigen hundert Nanometer vorliegen. Das lässt den Schluss zu, dass nur einige wenige Körner über die Schichtdicken der Proben vorhanden sind. Damit ist es naheliegend den Taylorfaktor (vgl. Abschnitte 2.2 und 3.3) in den nachfolgenden Simulationen auf einen größeren Wert (bspw. $\alpha = 1.1$) zu setzen, was in der entsprechenden Literatur (Gao, Huang, & Nix, 1999) für einkristallines Kupfer auch vorgeschlagen wird.

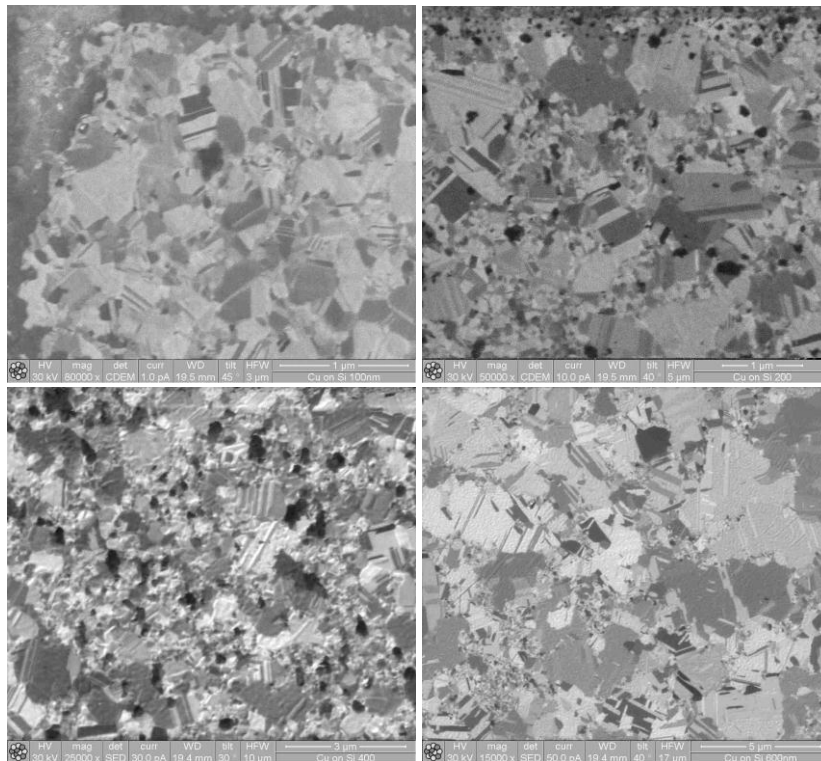


Bild 5-12: Aufnahmen mit Rasterelektronenmikroskop von Cu-Kristallen an Dünnschichtoberfläche (Huber & Schwan, 2004): Schichtdicken: 100nm (links oben); 200nm (rechts oben); 400nm (links unten); 600nm (rechts unten)

Da die bei der Nanoindentation aufgezeichneten Kraft-Indentationskurven auch meist noch dazu verwendet werden um den Elastizitätsmodul des Werkstoffs zu ermitteln, sind diese Ergebnisse hier ebenfalls dargestellt. Aus Bild 5-13 ist zu erkennen, dass der experimentell ermittelte E-Modul eine von der Indentationstiefe abhängige Größe darstellt, wie dies bei der Härte in Form des ISE zu beobachten ist. Auch bei den elastischen Eigenschaften ist zu beobachten, dass dünnere Schichten ein steiferes Verhalten aufweisen als dickere.

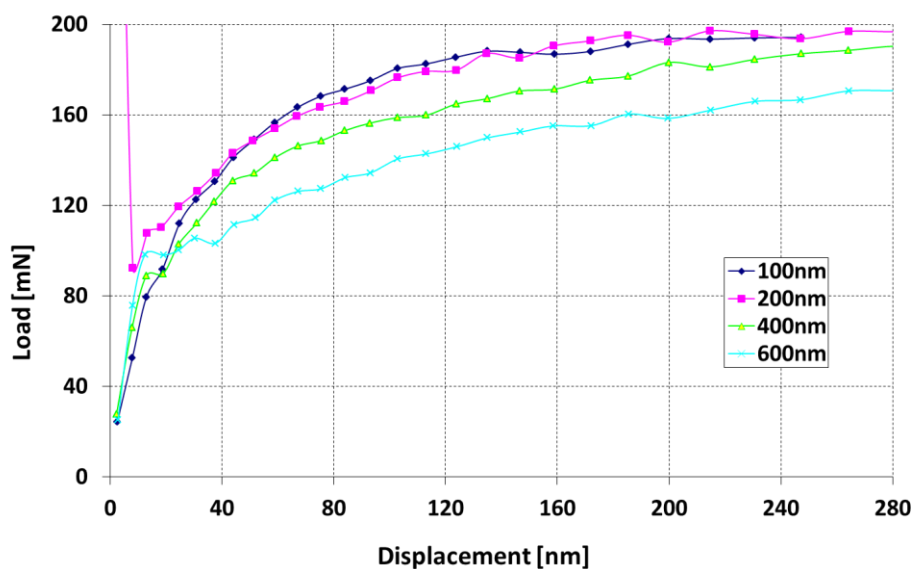


Bild 5-13: Experimentelle Ergebnisse Cu-Si System: Abhängigkeit E-Modul von Eindringtiefe und Schichtdicke

Die experimentellen Ergebnisse werden im Anschluß zum Vergleich mit Simulationsresultaten des implementierten Modells der „Mechanism based Strain Gradient Theory“ herangezogen.

Das Simulationsmodell zur Nanoindentation besteht hauptsächlich aus den zwei deformierbaren Körpern Indenter und Dünnschichtsystem. Dabei ist die Vickerspyramide als rein linear elastische Struktur angenommen worden.

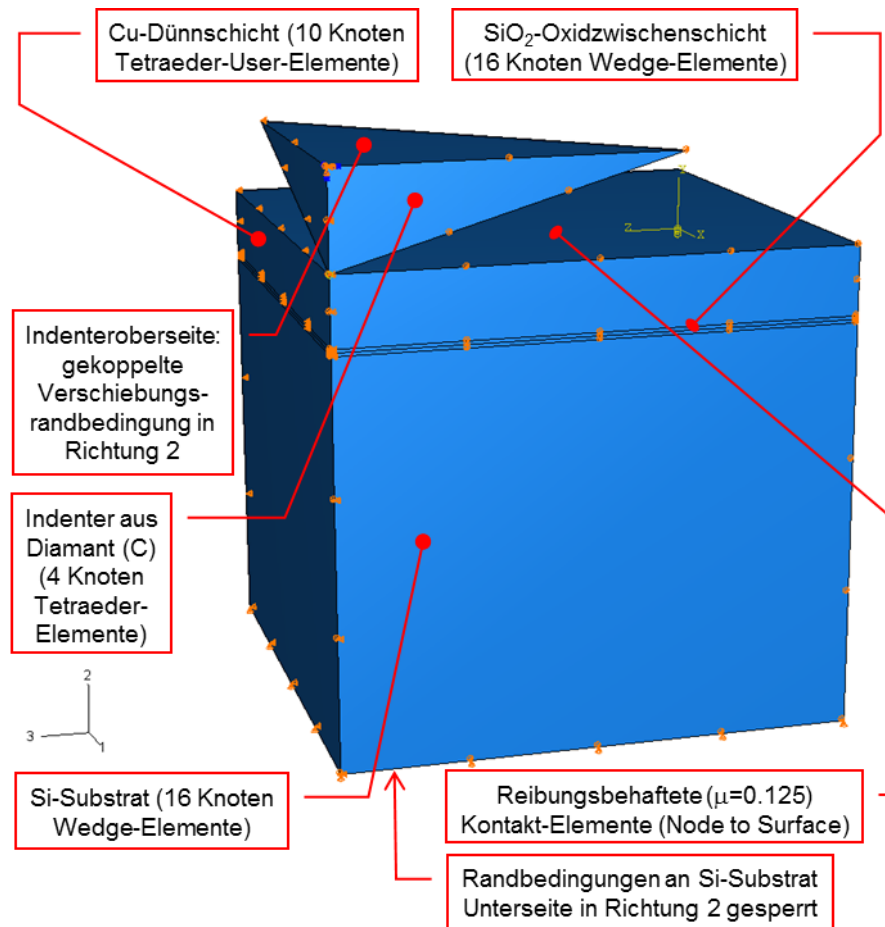


Bild 5-14: Simulationsmodell zur Nanoindentation

Das Multilayer-Dünnschichtsystem besteht aus der Kupferschicht und dem Siliziumsubstrat zwischen denen sich noch eine dünne Siliziumoxidschicht befindet. Grundsätzlich weist das System eine Kopplung zweier Nichtlinearitäten auf, welche einerseits durch den Kontakt zwischen Diamantspitze und Dünnschichtoberfläche und andererseits durch das nichtlineare Plastifizierungsverhalten des Kupferlayers gegeben sind. Das Materialverhalten des Siliziumsubstrats sowie der Siliziumoxid-Zwischenschicht ist als linear elastisch angenommen worden, da es sich hierbei um spröde Werkstoffe handelt, die kaum plastizieren. Aufgrund der doppelten Symmetrie des Gesamtmodells wurde die Simulation nur mit einem Modellviertel durchgeführt, was den Rechenaufwand erheblich reduzierte. Eine Zusammenstellung des Simulationsmodells mit den wichtigsten Annahmen ist Bild 5-14 zu entnehmen. Um eine effiziente Auswertung zu ermöglichen, wurden sämtliche Freiheitsgrade in axialer Richtung an der Basisfläche der Vickerpyramide an einen Masterknoten gekoppelt, dessen Verschiebung als Randbedingung vorgegeben worden ist. Die daraus resultierende Reaktionskraft entspricht der integralen Eindrückkraft während der Indentation.

In einem ersten Schritt wurde gezeigt, dass der experimentell nachweisbare Effekt der zunehmenden Steifigkeit dünner werdender Metallschichten mit konventionellen lokalen Modellen nicht adäquat beschreibbar ist, obwohl diese Modelle oft bei mechanischen Strukturen im Mikro- und Nanobereich angewendet werden.

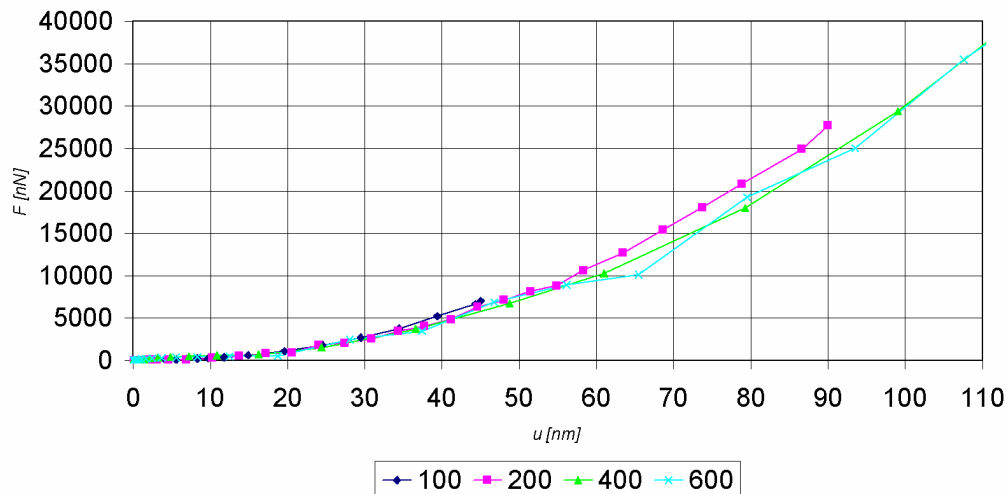


Bild 5-15: Simulationsergebnisse zur Nanoindentation mit klassischen lokalen Plastizitätsmodell (kein Skaleneffekt)

Alle in diesen ersten Simulationen verwendeten Modellparameter entsprechen jenen, welche im Folgenden auch für das nichtlokale Konstitutivgesetz benutzt wurden, wobei dies insbesondere für die makroskopische Fließkurve der Kupferdünnschicht gilt. Die Ergebnisse der Simulationen mit dem klassischen Plastizitätsmodell (Bild 5-15) zeigen im Gegensatz zu den experimentellen Resultaten (Bild 5-11 links) praktisch keinen Skaleneffekt in den Kraft-Verschiebungskurven. Dies unterstreicht die Notwendigkeit eines Materialmodells, welches die Mikrostruktur in ausreichendem Maß beschreiben kann. Damit kann aber auch die Modellierung des Versagensverhaltens dünner heterogener metallischer Schichten auf keramischen Substraten mit klassischen lokalen Plastizitätsmodellen ausgeschlossen werden. D.h., eine physikalisch sinnvolle Modellierung des Versagensverhaltens ist nur möglich, wenn das Deformationsverhalten befriedigend abgebildet werden kann.

Bild 5-16 zeigt exemplarisch für die Schichtdicke von 200nm die Abweichungen der klassischen Plastizität von der MSG Plastizität. Festgestellt wurden Fehler in Größenordnungen von mehr als 300% (Bild 5-16) für Schichtdicken von 200nm und von knapp unter 200% für Schichtdicken von 600nm. Dieser Vergleich basiert auf Taylorfaktoren im MSG Modell, die polykristalline Eigenschaften ($\alpha \approx 0.7$) abbilden, um auf diese Weise die bestmögliche Konsistenz zum lokalen Plastizitätsmodell zu gewährleisten. Der Fehler ist noch wesentlich größer, wenn Taylorfaktoren verwendet werden, die einkristallines Verhalten der Schicht darstellen, was den realen Verhältnissen laut Probencharakterisierung sicher eher entspricht.

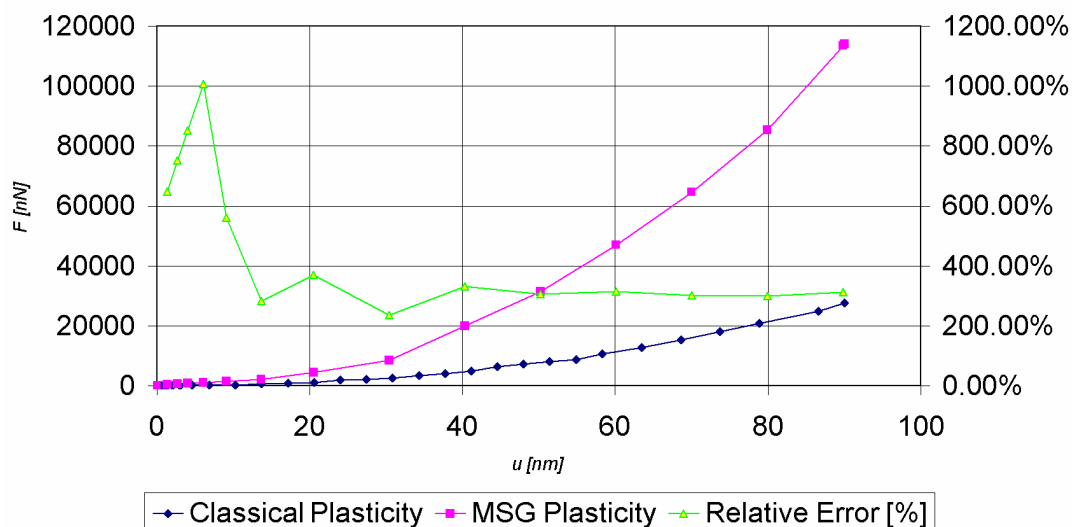


Bild 5-16: Simulationsvergleich von klassischen lokalen und gradientenbasierten nichtlokalen (MSG) Plastizitätsmodellen an einer Kupferschicht mit 200nm Dicke

Das skalenabhängige Antwortverhalten des metallischen Cu-Si Dünnschichtsystems kann für die untersuchten Dicken von 100, 200, 400 und 600nm durch das Simulationsmodell unter Verwendung des nichtlokalen MSG Plastizitätsansatzes sehr gut wiedergegeben werden (Bild 5-17). In den Simulationen wurde dabei ein Taylofaktor von $\alpha = 1.1$ verwendet, was durch die rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen gut begründbar ist.

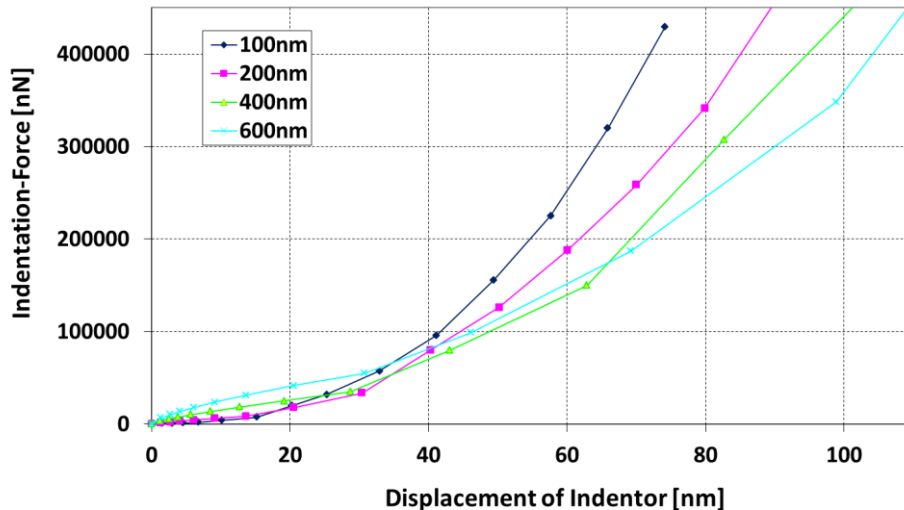


Bild 5-17: Simulationsergebnisse zur Nanoindentation mit nichtlokalen MSG-Plastizitätsmodell (Skaleneffekt)

Ein Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen mit den am Forschungszentrum Karlsruhe durchgeführten Nanoindentationen zeigt eine überaus gute Übereinstimmung. Besonders bemerkenswert ist hierbei die Tatsache, dass nicht nur für einzelne Schichtdicken vergleichbares Verhalten mit den experimentellen Ergebnissen resultiert, sondern für alle durchgeführten Schichtstärken sehr gute Übereinstimmungen (Bild 5-18) mit den Versuchen vorliegen. Diese Tatsache kann als starkes Indiz dafür gewertet werden, dass die Versetzungsbewegungen für belastete Strukturen auf dieser Skala tatsächlich der zentrale Mechanismus ist, welcher in einem Materialmodell abgebildet werden muss, um das Deformationsverhalten richtig zu beschreiben.

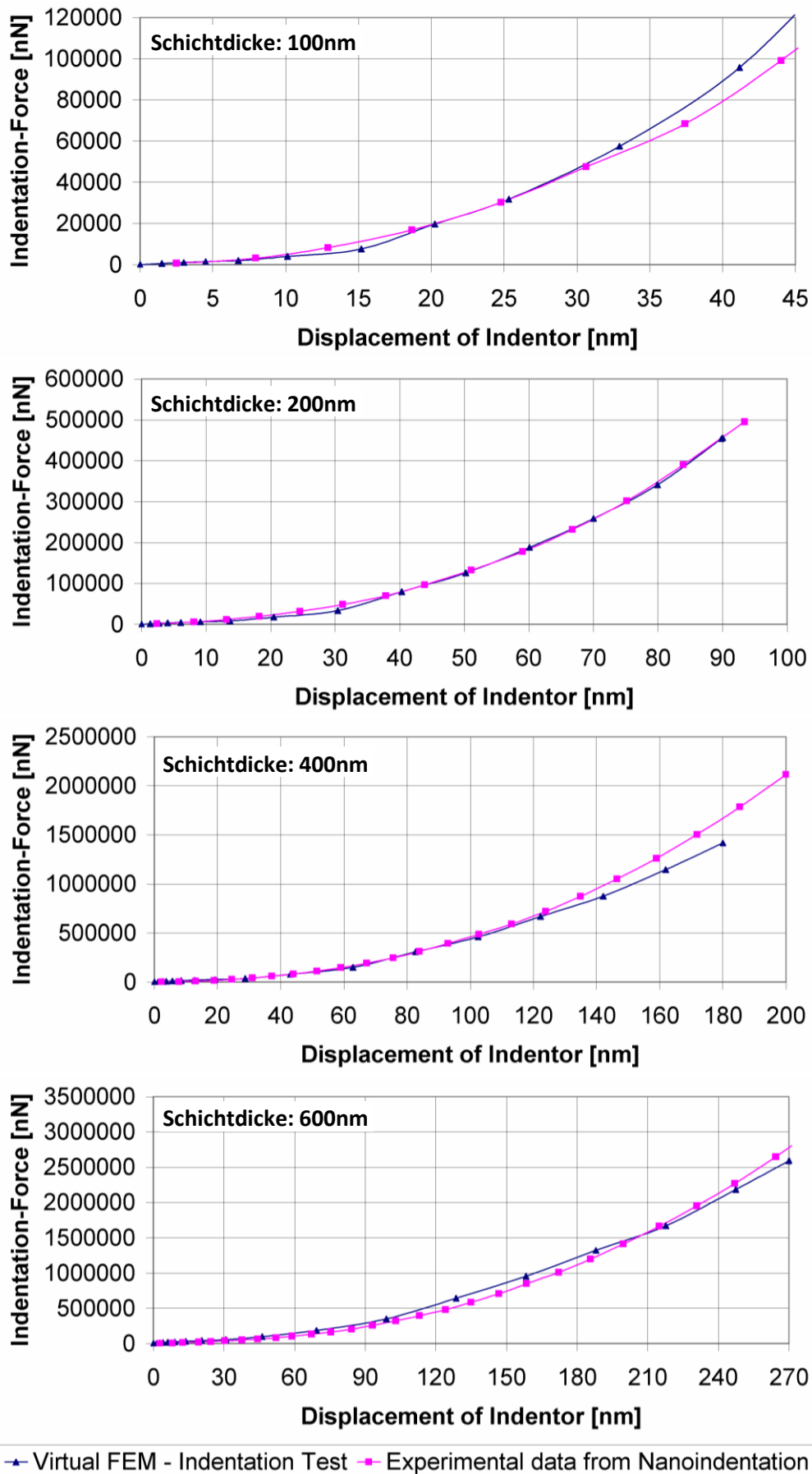


Bild 5-18: Nanoindentation, Vergleich zwischen Simulation und Experiment unterschiedlicher Schichtdicken: 100nm (1. Bild von oben); 200nm (2. Bild von oben); 400nm (3. Bild von oben); 600nm (4. Bild von oben)

Aus den Simulationen kann ein weiteres interessantes Resultat extrahiert werden. Bild 5-19 zeigt den relativen Fehler in Abhängigkeit von der dimensionslosen relativen Indentationstiefe, wobei letztere Größe durch den Quotienten aus Eindringtiefe und Schichtstärke definiert ist.

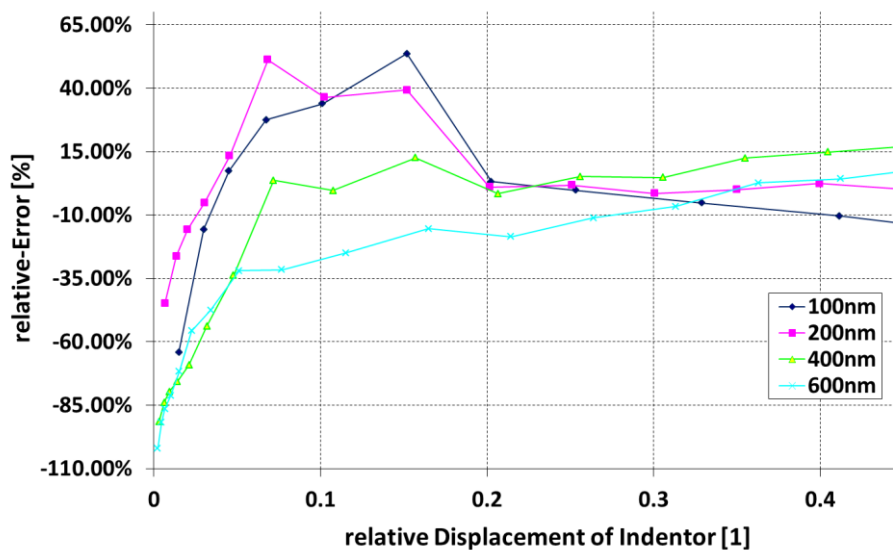


Bild 5-19: Relative Abweichungen zwischen Simulation und Experiment bei Nanoindentation

Bild 5-19 legt den Schluss nahe, dass die größeren Abweichungen am Anfang hauptsächlich durch die sich noch stark verändernden Kontaktbedingungen zustande kommen, welche von der lokalen Diskretisierung beider Flächen abhängen. Zudem ist noch zu berücksichtigen, dass die Spitze des Prüfkörpers eine mathematische Unstetigkeit in der Flächennormalen der Kontaktbeschreibung darstellen, die in weiterer Folge singularitätsähnliche Zustände am Beginn der Indentation bewirken können. Diese Störungen klingen mit zunehmender Eindringtiefe rasch ab, da sich dann die Kontaktzone entsprechend konstituiert hat. Bereits für relativ geringe Eindringtiefen liegt der Fehler bereits unter 40%.

Exemplarisch ist in Bild 5-20 (links) noch die Verteilung der Vergleichsspannung im gesamten Modell für eine Schichtdicke von 400nm dargestellt.

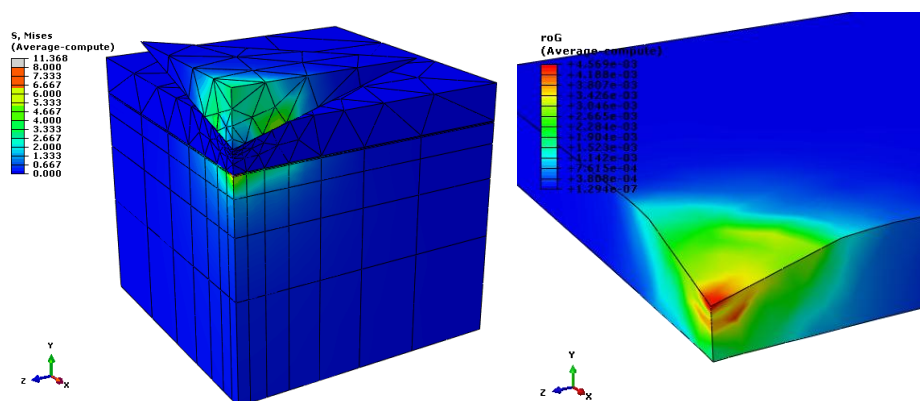


Bild 5-20: Simulationsergebnisse Nanoindentation: Mises Spannungsverteilung am Indenter, Oxidzwischenstschicht und Si-Substrat (links); Geom. notwendige Versetzungsdichteverteilung im Cu des nichtlokalen MSG-Plastizitätsmodells (rechts)

Bild 5-20 (rechts) zeigt ergänzend die Verteilung der geometrisch notwendigen Versetzungsdichte in der Schicht. Die größten Belastungen treten demnach in der Oxidschicht zwischen dem metallischen Kupferfilm und dem Siliziumsubstrat auf, wobei die extremalen Spannungen noch weit in Regionen des Siliziums hineinreichen. Dieser Umstand spielt in Folgenden Betrachtung zu möglichen Grenzflächenrissen eine Rolle. Wie zu erwarten liegen die maximalen Versetzungsdichten direkt auf und knapp unter der Kontaktoberfläche an der sich auch die Spitze des Vickersprüfkörpers befindet.

Im Weiteren wurde der Einfluss verschiedener Modellparameter für eine Kupferschicht mit einer Dicke von 200nm untersucht. Dabei wurden folgende Eigenschaften variiert:

- I. Taylorfaktor zur Beschreibung der Versetzungsbewegung
- II. Reibungskoeffizient in der Kontaktzone zwischen Prüfkörper und Schichtoberfläche
- III. Präsenz der Siliziumoxidschicht zwischen Kupferoberschicht und Siliziumsubstrat
- IV. Größe der Mesozelle welche das RVE in der Kupferschicht beschreibt

Die Ergebnisse sind in Bild 5-21 und Bild 5-22 dargestellt. Man erkennt, dass der dominierende Parameter des Gesamtmodells der Taylorfaktor ist (Bild 5-21 links). Die räumliche Ausdehnung der Mesozelle (Variation $\beta = \{5,10\}$), über welche die integrale Mittelung der mechanischen Größen erfolgt, zeigt wider Erwarten kaum Auswirkungen (Bild 5-21 rechts) auf das konstitutive Verhalten. Dies steht jedoch im Einklang mit analytischen Untersuchungen (Huang, Gao, Nix, & Hutchinson, 1999) anhand elementarer mechanischer Belastungsmuster wie reine Biegung oder Torsion.

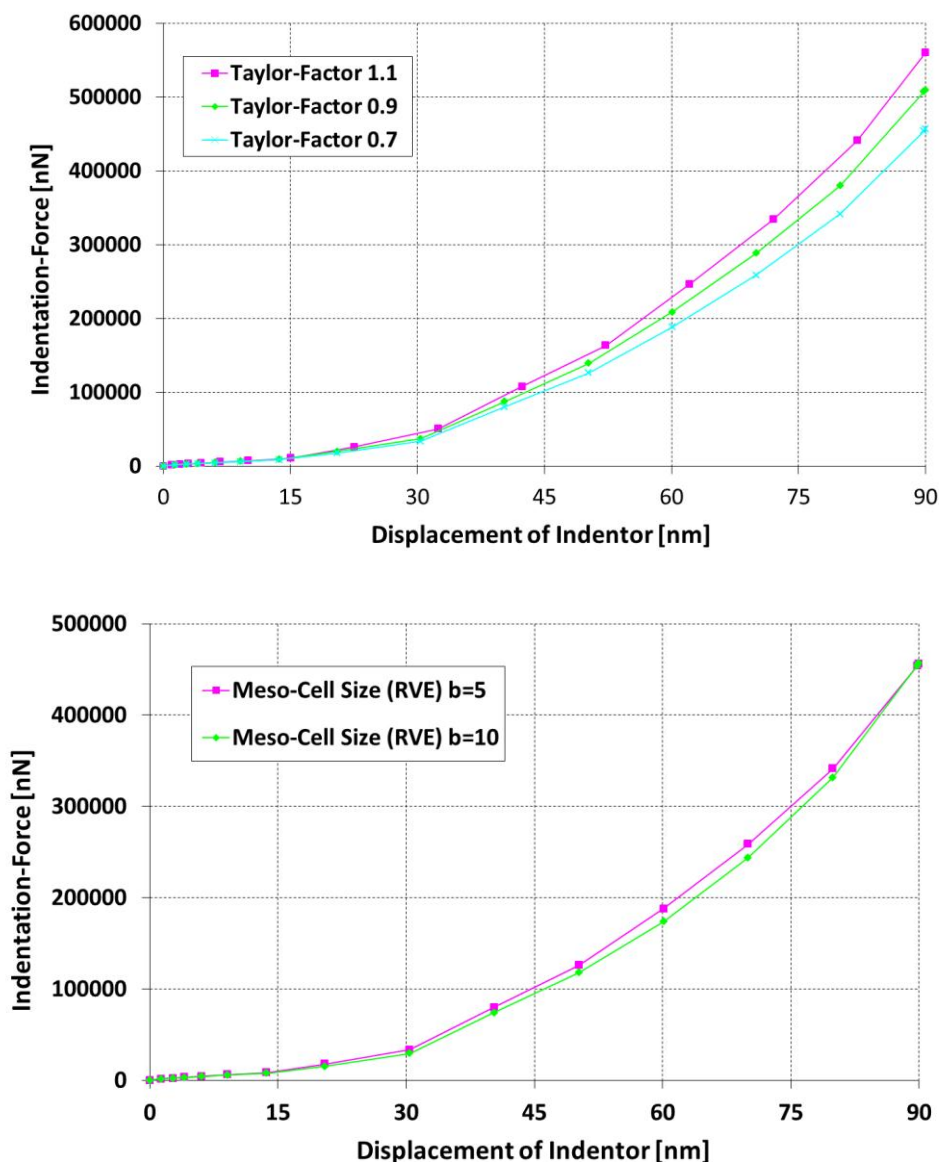


Bild 5-21: Parameterstudien bei Nanoindentation 200nm Schichtdicke: Taylorfaktor (oben); Größe Mesozelle (unten)

Der Reibungskoeffizient (Bild 5-22 links) wirkt sich zwar im Kraft-Verschiebungsverlauf etwas aus, hat aber nur einen moderaten Einfluss innerhalb des Gesamtsystems. Das Vorhandensein einer oxydischen Zwischenschicht (Bild 5-22 rechts), ist für das integrale Deformationsverhalten unbedeutend, was vermutlich auf den Substratwerkstoff Silizium zurückzuführen ist. Dieses Halbmetall weist in seiner Steifigkeit sehr ähnliches Verhalten auf wie dessen oxydische Verbindung.

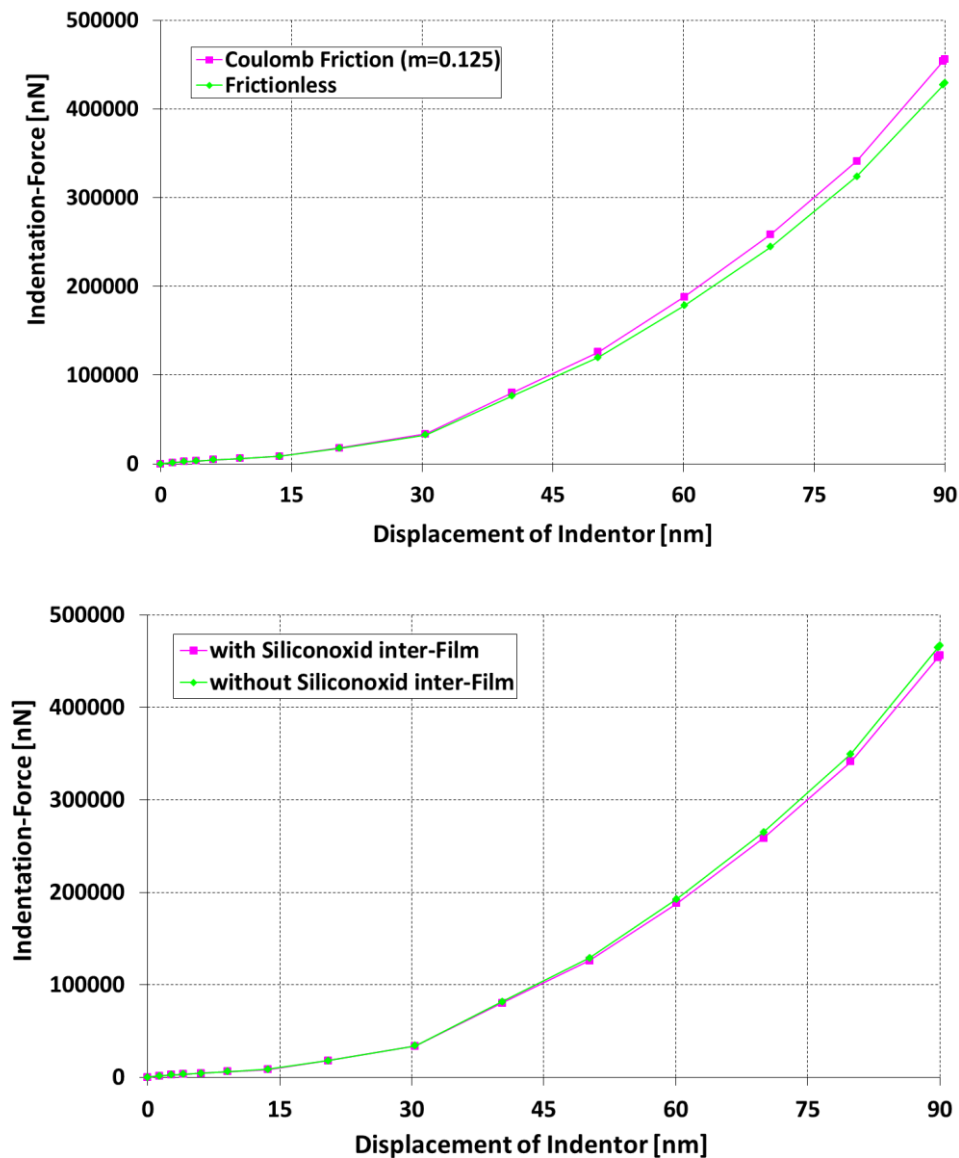


Bild 5-22: Parameterstudien bei Nanoindentation 200nm Schichtdicke: Reibung (oben); Oxydzwischenschicht (unten)

Um die Auswirkung der Prüfkörpergeometrie zu untersuchen, wurden weitere Simulationen mit einer Kugel (Radius 400nm), einem Berkovich Indenter (Pyramide mit gleichseitiger Grundfläche und Öffnungswinkel zwischen Achse und Seitenfläche von 65.03°) sowie der Vickerspyramide durchgeführt. In Bild 5-23 sind die Ergebnisse für den Kraft-Eindringverlauf dargestellt. Sie ermöglichen im Prinzip Untersuchungen in Bezug auf das Ähnlichkeitsprinzip nach Kick und auf die daraus abgeleiteten Ansätze von (Meyer, 1908) bzw. (Bernhardt, 1941) zur analytischen Behandlung des „Indentation Size Effects“ ISE (Meinhard, 1999). Auch könnten solche Untersuchungen für die Umrechnung von Härtewerten aus mikro- und makroskopischen Indentationsexperimenten dienen. Hierauf wurde aber im Rahmen dieser Arbeit verzichtet.

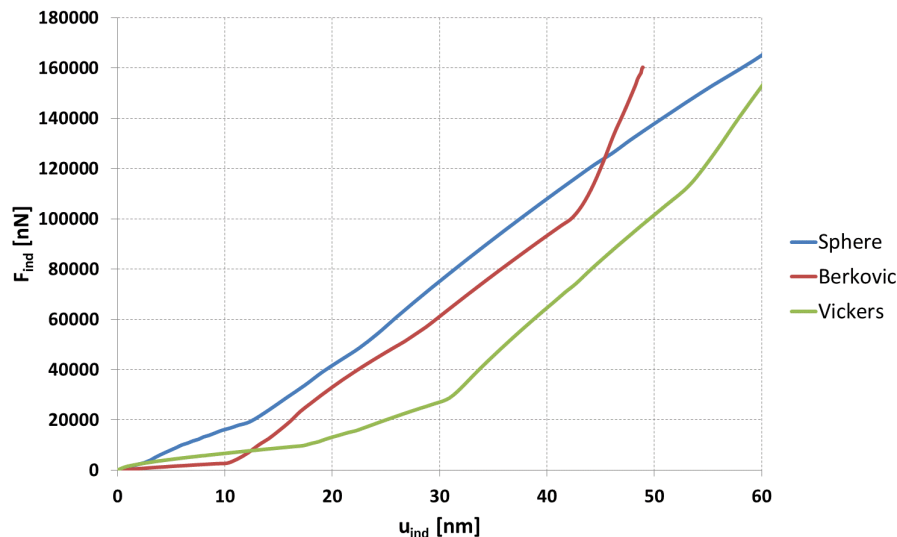


Bild 5-23: Einfluss der Prüfkörpergeometrie bei Nanoindentation einer 200nm dicken Cu-Schicht

Bei den 3D FEM Berechnungen zeigte sich, dass mit Hilfe des implementierten Materialmodells welches eine vollständig analytisch ermittelte Materialtangente verwendet, sehr gute Ergebnisse zu erzielen sind. In diesem Zusammenhang sind vor allem die Rechengeschwindigkeit und Genauigkeit der Simulationsergebnisse im Vergleich zu den Experimenten sowie die Stabilität und die Konvergenzordnung hervorzuheben. Die Modellversion mit einer aus finiten Differenzen ermittelten Materialtangente ist im Vergleich dazu deutlich langsamer (ca. Faktor 1.7 bis 2.5). Sie zeigte ein speziell im Zusammenhang mit anderen Nichtlinearitäten, wie beispielsweise dem Kontakt oder mit zusätzlichen kinematischen Zwangsbedingungen, ein deutlich instabileres Verhalten. Dies wirkte sich in einer geringeren Konvergenzordnung (maximal linear) sowie in öfters auftretenden Divergenzen aus.

In diesem Kontext wurden Untersuchungen zur Abhängigkeit der Lösungen von der verwendeten Diskretisierung durchgeführt. Hierfür wurden drei unterschiedlich fein vernetzte Modelle der Probengeometrie für eine Schichtdicke von 200nm an einem Berkovich Intender herangezogen. Die Anzahl der Elemente mit quadratischen Ansatzfunktion in der Kupferschicht betrugen dabei für die in Bild 5-24 verwendeten Bezeichnungen „coarse“ ca. 1400 Elemente (~2450 Knoten), „medium“ ca. 2800 Elemente (~4850 Knoten) und „fine“ ca. 5100 Elemente (ca. ~8670 Knoten). Man erkennt aus der Darstellung, dass für diese Netze kaum eine Netzabhängigkeit festzustellen ist.

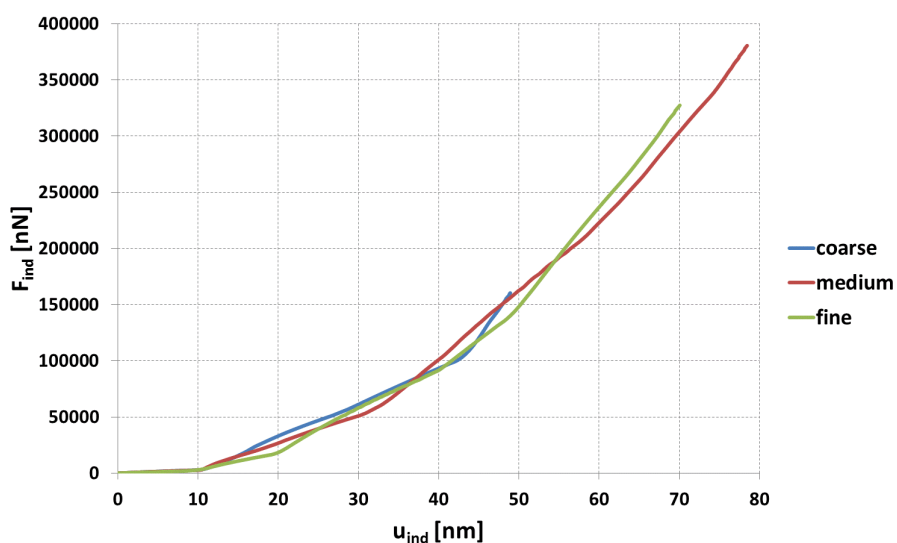


Bild 5-24: Einfluss der Diskretisierung bei Nanoindentation einer 200nm dicken Cu-Schicht mit Berkovich Intender

In diesem Zusammenhang ist es wichtig zu erwähnen, dass bei der Herleitung des Konstitutivgesetzes eine integrale Mittelung über die Mesozelle (RVE) durchgeführt wird. Dies kann als Kombination aus Gradiententheorie und nichtlokaler Kontinuumsmechanik interpretiert werden. Die erwähnte lokale Mit-

telung wird häufig im Kontext der Lokalisierung bei entfestigenden Materialverhalten (Bazant, Belytschko, & Chang, 1984) oder der Schädigungsmodellierung (Bazant & Pijaudier-Cabot, 1988), (Baaser & Tvergaard, 2003) verwendet. Sie entspricht einer Filteroperation in der Signaltheorie bei der hochfrequente Anteile des mehrdimensionalen Signals (Lösung des partiellen Differentialgleichungssystems) herausgefiltert werden. Dies hat zur Folge, dass sich der Typ des partiellen Differentialgleichungssystems nicht ändern kann, was bspw. durch die Auswertung des Akustiktensors (Rice, 1972), (Neilsen & Schreyer, 1993)

$$Q_{ik} := n_j \cdot D_{ijkl} \cdot n_l \quad (\text{Rel. 5-2})$$

verifizierbar ist (vgl. Abschnitt 2.3.2), (Schreyer & Neilsen, 1996). Ist also bei lokaler Steifigkeit D_{ijkl} für alle beliebige Richtungen n_i der Akustiktensor Q_{ij} positiv definit, so sind die zugehörigen Eigenwerte alle reellwertig positiv und implizieren reellwertige Wellenausbreitungsgeschwindigkeiten. Bezüglich eines Überblicks zu Regularisierungstechniken bei lokalisierenden Problemen sei auf die entsprechende Literatur (Baaser & Gross, 2003) verwiesen.

Aus diesen Betrachtungen resultieren schlüssige Begründungen, warum die in Bild 5-24 dargestellten Lösungen kaum Netzabhängigkeiten aufweisen. Zudem kann hierdurch auch die Robustheit des FEM Modells erklärt werden.

Die Simulationen lassen es zu, das sogenannte „piling-up“ und/oder „sinking-in“ Phänomen abzubilden (siehe Bild 5-26 und Bild 5-27). Dabei handelt es sich um das lokale Fließverhalten des Werkstoffs bei der Indentation. Definiert wird das „piling-up“ und „sinking-in“ an einem indentierten homogenen unendlich ausgedehnten Körper durch die im Bild 5-25 dargestellten geometrische Größen im Kontaktbereich.

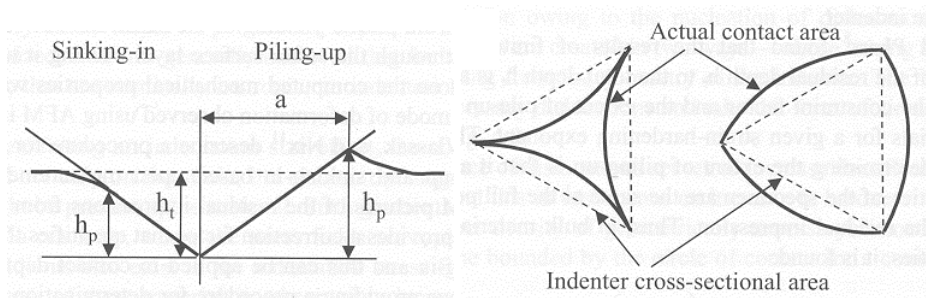


Bild 5-25: Nanoindentation: Definition von piling-up und sinking-in (Fischer-Cripps, 2011) an pyramidalen Indenter mit dreiseitiger Grundfläche

Darin beschreibt h_t die Indentationstiefe in Bezug zur Probenoberfläche und h_p legt den Normalabstand von der Indenterspitze fest, an dem sich das deformierte Probenmaterial gerade vom Kontaktbereich mit dem Prüfkörper ablöst (Bild 5-25 links). Durch das Deformationsverhalten des teilweise plastisch deformierten Probenkörpers entsteht eine Abweichung zur Kontaktzonenidealform (strichlierte Line in Bild 5-25 rechts), welche durch die Prüfkörpergeometrie determiniert ist. Quantifiziert werden kann dies über den Quotient γ , der das Verhältnis aus h_p zu h_t darstellt (Fischer-Cripps, 2011).

$$\gamma := \frac{h_p}{h_t} \quad (\text{Rel. 5-3})$$

Ist γ größer als Eins so spricht man von „piling-up“, bei einem Wert kleiner als Eins liegt „sinking-in“ vor. Ein einfaches Erklärungsmodell zur Ausbildung dieses Phänomens kann unter Annahme eines homogenen Probekörpers mit Hilfe der dimensionslosen Zahl κ finden, die das Verhältnis zwischen Elastizitätsmodul E (Steifigkeit) zur Anfangsfließspannung σ_y festlegt:

$$\kappa := \frac{E}{\sigma_y} \quad (\text{Rel. 5-4})$$

Danach führen geringe Fließspannungen σ_y bzw. große Steifigkeiten E zu einer Erhöhung von κ . Es ist offensichtlich, dass große Steifigkeiten für gleiche, während der Indentation vorgegebene Deformationen eher zum Erreichen der Fließgrenze führen, wobei dieser Effekt durch geringere Fließspannungen noch verstärkt wird. Dagegen bewirken kleinere Steifigkeiten für gleiche, während der Indentation vorgegebene Deformationen, ein verzögertes Eintreten plastischer Verformungen, wobei dieses Verhalten durch größere Fließspannungen verstärkt wird. Demzufolge führen große Werte von κ zu einer ausge-

dehnten Ausbildung des plastisch deformierten Bereichs, der normalerweise weit über die Indenterkontaktzone hinaus reicht, was wiederum ein „piling-up“ wahrscheinlich macht. Umgekehrt verhält es sich bei kleinen Werten von κ . In diesem Fall ist der plastisch deformierte Bereich eher klein, wodurch dieser innerhalb der Indenterkontaktzone endet, was wiederum ein „sinking-in“ wahrscheinlich macht.

Diese Betrachtungen sind natürlich nur qualitativer Natur, da es zu klären bleibt, wie große bzw. kleine Werte von κ zu Quantifizieren sind. Zudem sind die Verhältnisse bei mehrlagigen Dünnschichtsystemen erheblich komplexer. Diese sind oft aus Werkstoffen aufgebaut die stark unterschiedliche Steifigkeiten und Fließspannungsgrenzen aufweisen (Mann, 2008). Dementsprechend zeigen sehr dünne weiche auf dicken harten Schichten oder Substraten ein wesentlich komplexeres Verhalten bezüglich „piling-up“ oder „sinking-in“. Außerdem ist davon auszugehen, dass die Reibungsverhältnisse in der Kontaktzone das lokale Fließverhalten beeinflussen, was in den vorigen Betrachtungen aber unberücksichtigt geblieben ist. Trotzdem stellt das Erklärungsmodell für homogene Körper zum „piling-up“ bzw. „sinking-in“ einen durchaus brauchbaren Ansatz zum Verständnis des Phänomens dar.

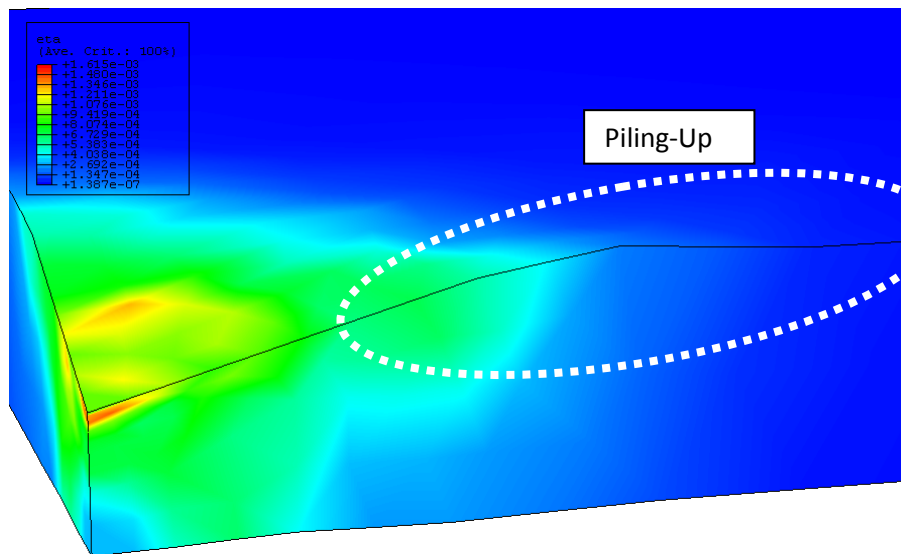


Bild 5-26: Nanoindentation piling-up Phänomen an Cu-Dünnschicht von 100nm Dicke auf Si Substrat

Mit dem hier vorgestellten Indentationsmodell kann das Verhalten des beschriebenen Phänomens deutlich verbessert untersucht werden, als dies in einigen klassischen numerischen FEM Modellen bislang umgesetzt wurde. So konnte in dieser Arbeit nachgewiesen werden, dass für quantitative Aussagen nichtlokale Plastizitätsmodelle zu verwenden sind. Mit dem hier vorgestellten Simulationsmodell sind detailliertere Studien zum wichtigen Anwendungsbereich der Nanoindentation möglich.

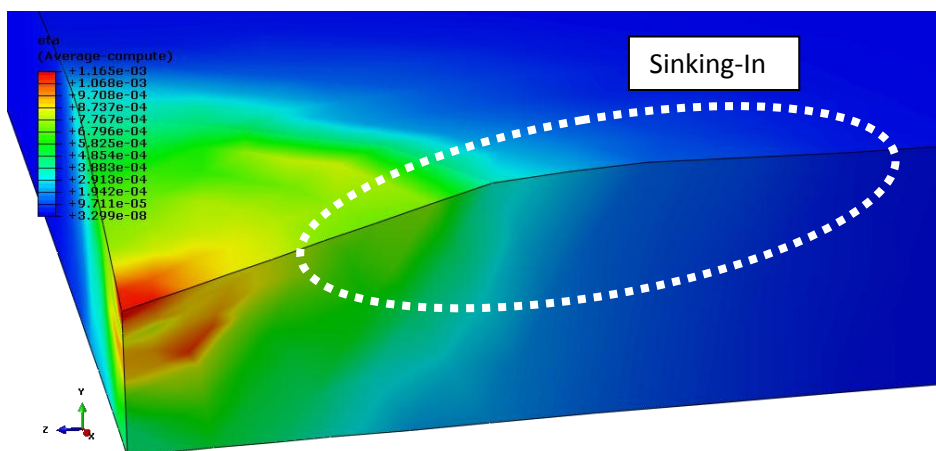


Bild 5-27: Nanoindentation sinking-in Phänomen an Cu-Dünnschicht von 400nm Dicke auf Si Substrat

Exemplarisch zeigen Bild 5-26 und Bild 5-27 das unterschiedliche „piling-up“ bzw. „sinking-in“ für duktile metallische Dünnschichten von 100nm bzw. 400nm auf einem harten Substrat. Dieses Phänomen kann

von lokalen Plastizitätsmodellen aufgrund ihres skalenunabhängigen Verhaltens unzureichend abgebildet werden.

5.3 Ansätze zur Beschreibung der Rissbildung

Im Abschnitt 5.2 wurde darauf hingewiesen, dass das MSG Plastizitätsmodell einen geeigneten Ausgangspunkt zur Beschreibung des Versagensverhaltens dünner metallischer Schichten darstellt. Bild 5-28 zeigt die für das Versagensverhalten maßgeblichen Defekte bzw. Heterogenitäten.

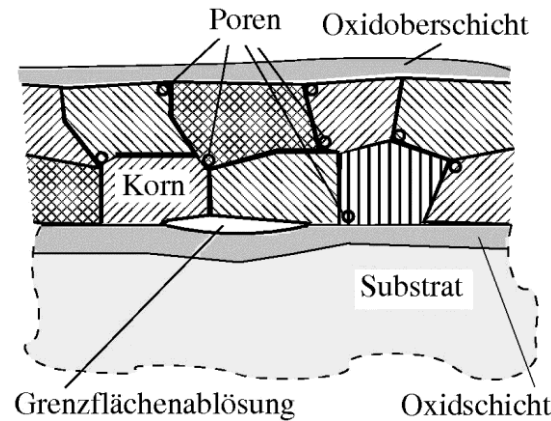


Bild 5-28: Detaillierter Überblick von Imperfektionen einer Metalldünnschicht auf Substrat

Eine detailgetreue Auflösung aller möglichen Imperfektionen innerhalb eines Gesamtmodells ist kaum oder nur mit sehr hohem Aufwand machbar. Aus diesem Grund soll in diesem Abschnitt als einziger Defekt nur die Möglichkeit von Grenzflächenrissen zwischen Schicht und sprödem Substrat betrachtet werden, wobei die Vorgehensweise auch auf Risse zwischen den Körnern sowie im Bulkmaterial übertragbar ist.

Die wohl eleganteste Methode zur Beschreibung der Rissbildung und des -wachstums ist die „eXtended Finite Element Method“ kurz xFEM. Mit diesem Verfahren können allgemeine Diskontinuitäten, wie bspw. Risse, unabhängig und flexibel von der gegebenen Diskretisierung abgebildet werden. Da es sich bei dieser Methode um eine relativ neue Entwicklung innerhalb der Finiten Element Technologie handelt, gibt es gegenwärtig kaum kommerzielle FEM-Systeme und nur wenige frei verfügbare akademische Eigenentwicklungen, welche die xFEM bereits implementiert haben. Bei den wenigen Softwaresystemen, welche die xFEM bereitstellen, kann dieses Konzept zudem nur auf sehr eingeschränkte Problemfelder bzw. Konstitutivgesetze angewendet werden. So ist es in diesen FEM Codes nicht möglich, angereicherte Elemente zur Darstellung der Diskontinuität von Rissen mit Benutzerelementen zu koppeln. Dementsprechend kann das in einem Benutzerelement implementierte nichtlokale MSG-Plastizitätsmodell nicht verwendet werden oder das benutzerdefinierte Element müsste um die xFEM erweitert werden, was aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Aus diesem Grund wurde auf das Konzept von Kohäsivzonenmodellen zurückgegriffen, die bereits im Abschnitt 2.5.1 detaillierter beschrieben worden sind.

Bei konkreten Anwendungen des Kohäsivzonenmodells müssen die Kohäsivzonenelemente zwischen den Grenzflächen aneinandergrenzender Elemente innerhalb einer zulässigen Diskretisierung platziert werden. Deshalb müssen die Knoten, welche den angrenzenden Elementen in der Diskretisierung gemeinsam sind, entsprechend dupliziert werden. Dadurch werden sämtliche Elemente im betroffenen diskretisierten Raum voneinander getrennt und im mathematischen Sinn entkoppelt. Im Anschluss daran werden diese entkoppelten Elemente durch Einfügen von Kohäsivzonenelementen wiederum zu einer zusammenhängenden Struktur mit einer für die FEM zulässigen Diskretisierung vereinigt. Die dadurch entstehende physikalische Struktur ist in der Lage das Initiieren und Fortschreiten von Rissen unter komplexen mechanischen Belastungsmustern approximativ abzubilden, wobei der Risspfad auf die Grenzflächen zwischen den Elementen restringiert ist. Dieses Konzept ist ganz allgemein anwendbar, weshalb nicht nur die Grenzfläche zwischen der Metalldünnschicht und dem Substrat, sondern die gesamte räumliche Struktur der Metalldünnschicht mit Kohäsivzonenelementen versehen werden kann. Zu diesem Zweck wurde in der vorliegenden Arbeit ein Programm entwickelt, das allgemeine räumliche Strukturen oder Grenzflächen mit gültiger Diskretisierung, sowohl für zwei- als auch dreidimensionale Probleme mit Kohäsivzonenelementen versieht und daraus resultierend eine modifizierte

Diskretisierung für das FE-Modell generiert. Welche Bereiche im Gesamtmodell modifiziert werden sollen, wird über Elementmengen festgelegt, die entweder nur die Interfaces oder aber ganze Volumenbereiche beschreiben.

An dieser Stelle sei auf ein Detail beim konzeptionellen Vorgehen hingewiesen. In fast allen FEM-Systemen sind Kohäsivzonenelemente implementiert deren Knoten sich ausschließlich an den Ecken des Elements befinden und die keine weiteren Knoten in den Kantenhalbierenden der beiden Basisflächen besitzen (Bild 5-29 links). Aus diesem Grund

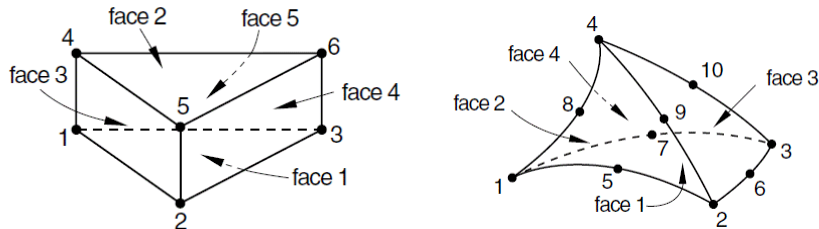


Bild 5-29: Elemente und Knoten (Abaqus Analysis User's Manual v6.10-1, 2010):
Kohäsivzonenelemente (links), Benutzerelemente (rechts)

mußte bei der Ankopplung an die Seitenflächen der MSG Benutzerelemente (Bild 5-29 rechts) eine spezielle Anpassung vorgenommen werden, um eine gültige Diskretisierung zu erhalten. Zu diesem Zweck wurden mehrere Kohäsivzonenelemente nach dem im Bild 5-30 dargestellten Schema platziert, was den Aufbau eines konsistenten und für die FEM gültigen Netzes ermöglichte.

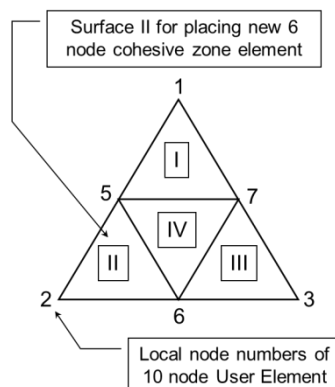


Bild 5-30: Rissmodellierung: Kopplung der Seitenflächen zweier benachbarter 10-Knoten Tetraederelementen mit Hilfe von 4 Kohäsivzonenelementen

Grundsätzlich ist es möglich geometrisch inkonsistente Diskretisierungen mittels zusätzlicher Zwangsbedingungen aneinander zu koppeln. Dies hat aber weitere Nebenbedingungen im Gesamtgleichungssystem zur Folge, welche wiederum mittels Lagrangescher Multiplikatormethoden zu behandeln sind und dadurch die Komplexität in dem ohnehin schon hoch nichtlinearen Problem weiter verstärkt. Außerdem ist diese Methode nur an einer von der Diskretisierung gegebenen Phasengrenzfläche, wie bspw. Metall-Keramik oder Korngrenzen etc., einfach durchzuführen. Innerhalb eines homogenen Volumenbereichs müsste man spezielle Programme entwickeln, welche die Kohäsivzonenelemente in ein vorhandenes Netz einfügen und die freien Knoten, welche zur inkonsistenten Diskretisierung führen, an die Grenzflächen koppeln. Für den Fall der Metall-Keramik Grenzfläche wurde der eben beschriebene Ansatz probeweise durchgeführt, wobei die beschriebenen Nachteile in Form von Konvergenzproblemen der impliziten FEM Formulierung bestätigt wurden und sich zusätzliche Abweichungen in der Lösung des Problems zeigten.

Die für eine Verwendung der Kohäsivzonenelemente notwendige Modifikation der gegebenen Diskretisierung wurde durch die Eigenentwicklung einer speziellen Software umgesetzt. Dieses Programm reststrukturiert vorhandene reguläre Vernetzungen bestimmter Volumenanteile oder ausgezeichneter Grenzflächen, indem zusätzliche flächige Elemente eingefügt werden. Durch diese Kohäsivzonenelemente können im belasteten Zustand die Versagensprozesse abgebildet werden. Exemplarisch sind im Bild 5-31 die durch die Software eingefügten erweiterten Diskretisierungen dargestellt, wobei die Metall-

Keramik Grenzfläche (Bild 5-31 links) sowie das Volumen (Bild 5-31 rechts) der Metallschicht jeweils in ihrer Basisdiskretisierung restrukturiert worden sind.

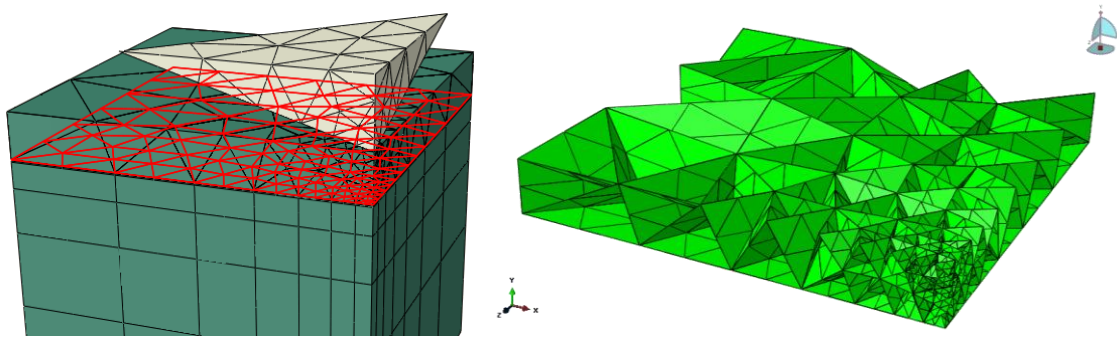


Bild 5-31: Für Rissmodellierung eingefügte Kohäsivzonenelemente: An der Metallschicht- Substratgrenzfläche (links); Im gesamten Volumenbereich der Metallschicht welche die 10-Knoten Tetraederelemente enthält (rechts)

Für das konstitutive Versagensverhalten kam ein klassisches Kohäsivzonenmodell zum Einsatz, dass aus den 3 Teilen Schädigungsinitiierung, Schädigungsevolution sowie der Berücksichtigung des Versagensverhaltens bei Mixed-Mode Belastungen besteht. Die Darstellung dieses Verhaltens erfolgt nach dem Konzept eines „Traction-Separation-Law“ (siehe Abschnitt 2.5.1) mit steifem linearem Verhalten im ungeschädigten Zustand. Die Schädigungsinitiierung wurde spannungsbezogen, die Evolution durch exponentiell abklingende Energiefreisetzungsraten und die Mixed-Mode Behandlung durch energiebasierte Potenzrelationen formuliert (Abaqus Analysis User's Manual v6.10-1, 2010). Da auf der Mikro- bzw. Nanoskala das Bruch- bzw. Versagensverhalten experimentell noch nicht hinreichend detailliert untersucht ist, können aufgrund teils fehlender Materialkennwerte nur Abschätzungen für das Schädigungs- bzw. Versagensverhalten getroffen werden.

Um konkrete Rechnungen durchführen zu können, wurde der für die Rissinitiierung notwendige kritische Spannungswert in einer Größe festgelegt, der zwischen den Bruchspannungen von Schicht- und Substratmaterial liegt. In der Metallschicht wurde für die Rissinitiierungsspannung ein Wert in der Größe der Bruchspannung des vorliegenden Materials verwendet. Die Rissevolution wurde mittels Daten für die kritische Energiefreisetzungsrate aus experimentellen Untersuchungen in der Literatur (Waters & Volinsky, 2005), (Chang, Chang, & Lee, 2005), (Thouless, 1994) behandelt. Mit diesen Werten wurden qualitative Untersuchungen am erstellten Modell durchgeführt, die sowohl mögliche Grenzflächenrisse zwischen Substrat und Metallschicht als auch das Versagensverhalten im Metallfilm zum Gegenstand haben.

Für die Evolution von Grenzflächenrissen konnte eine relativ frühe Initiierung im Bereich unter der Spitze des Vickersindenters beobachtet werden. Schon bei Indentationstiefen von rund 6% der Schichtdicken traten erste Schädigungen an der Grenzfläche auf. Dies ist auf die großen Unterschiede in den Querkontraktionszahlen der Metallschicht (Cu, Ag) und dem Oxydlayer zwischen Substrat (Si) und Metall zurückzuführen. Durch die druckdominanten Belastungen während der Nanoindentation rufen sie größere Deformationsunterschiede an der Ober- und Unterseite des Interfaces hervor, woraus hohe Schubspannungen resultieren, welche Mode-II Risse entstehen lassen. Wird die Oxydschicht im Modell entfernt, so entstehen erst bei ca. 11% Indentationstiefe erste Risse im Interface, da dann der Unterschied in den Querkontraktionszahlen wesentlich geringer ist. Im Bild 5-32 sind unterschiedliche Stadien der Rissentwicklung an einer 400nm starken Dünnschichtprobe in Abhängigkeit von der Indentationstiefe dargestellt, wobei die Abbildungen nur einen kleinen Bereich unterhalb des Indenters zeigen.

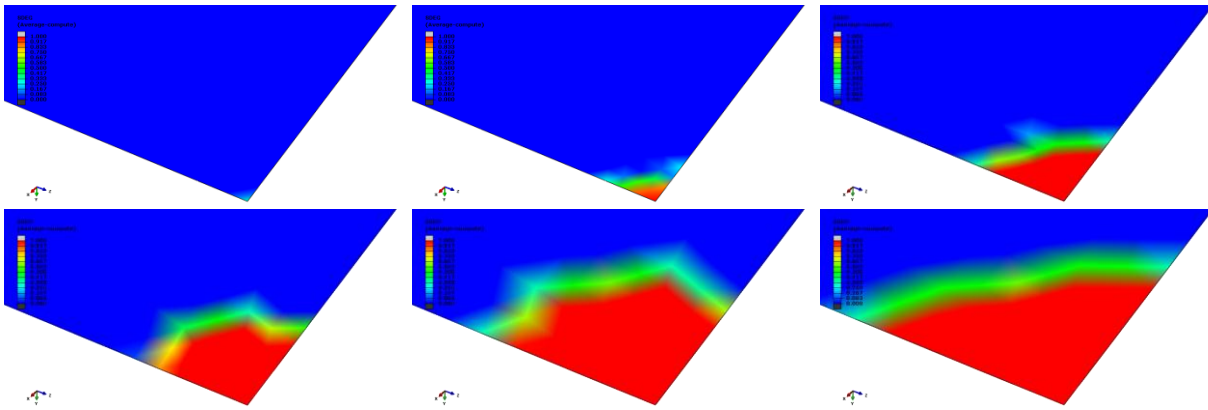


Bild 5-32: Grenzflächenrissentwicklung zwischen 400nm Metaldünnschicht und Substrat:
 Rissinitiation 6% Indentationstiefe (links oben); 9% I.-Tiefe (Mitte oben); 12% I.-Tiefe (rechts oben);
 15% I.-Tiefe (links unten); 20% I.-Tiefe (Mitte unten); 25% (rechts unten)

Bei großen Werten der Rissinitiationsspannung weicht der Bruchentstehungsverlauf etwas von dem in Bild 5-32 dargestellten Verlauf ab. Der Riss entsteht dann nicht direkt unter der Indenterspitze sondern etwas versetzt. Mit steigender Indentationstiefe stellt sich jedoch relativ rasch ein ähnliches Muster ein wie in Bild 5-32. Werden die verschiedenen Parameter des TSL bezüglich Rissinitiation bzw. Rissevolution variiert, so verläuft zwar die Evolution des Risses in der Anfangsphase jeweils unterschiedlich nach einem komplizierten Muster, ist aber dann mit steigender Eindringtiefe mehr oder minder monoton von innen nach außen gerichtet. Inwiefern der Verlauf der Rissausbreitungsmuster in der Anfangsphase die realen Gegebenheiten widerspiegelt, ist unklar. Die von innen nach aussen gerichtete Versagensentwicklung nach der Rissentstehung stellt dagegen ein erwartetes Verhalten dar, welches wahrscheinlich den tatsächlichen Verhältnissen entspricht. Werden die Parameter, welche die Initiation und Evolution von Rissen determinieren, auf geringere Werte gesetzt, als in der beschriebenen Standardmodellvariante (Bild 5-32), dann werden bereits in einem frühen Stadium der Indentation Grenzflächenrisse initiiert und breiten aus.

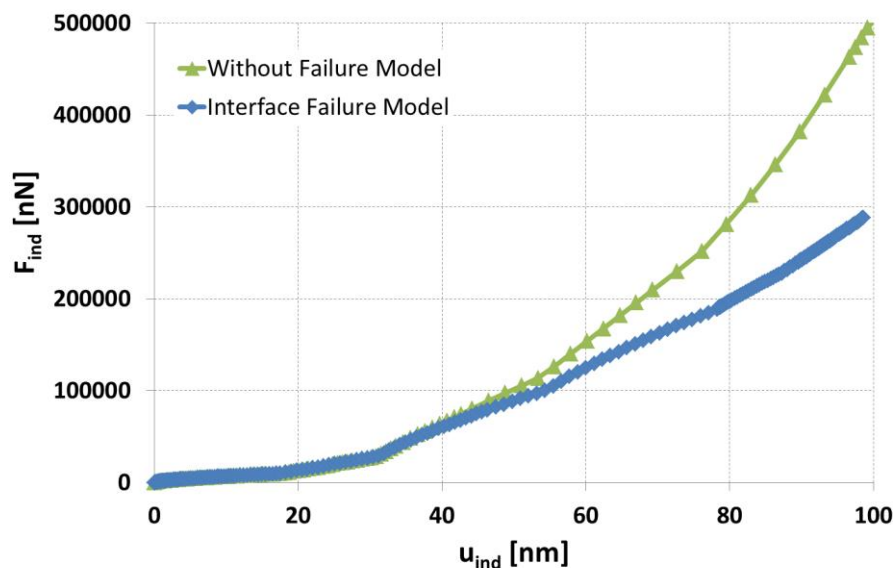


Bild 5-33: Modellvergleich Nanoindentation an 400nm Metaldünnschicht mit (blau) und ohne Grenzflächenriss (grün)

Eine Gegenüberstellung der Kraft-Verschiebungskurven mit und ohne Schädigungsevolution (Bild 5-33) zeigt für das geschädigte Schichtsystem einen wesentlich weicheren Verlauf für größere Eindringtiefen. Dies ist auf die örtliche Verringerung des Deformationswiderstandes (lokale Reduktion der Festigkeit) in alle Richtungen innerhalb der Grenzfläche zurückzuführen. Damit zeigt das Gesamtmodell ein qualitatives Verhalten, auf dem weitere Untersuchungen aufbauen können. Inwiefern mit den vorgeschlagenen Ansätzen quantitative Vorhersagen möglich sind bleibt abzuwarten.

In einem nächsten Schritt wurden zu den vorhandenen Kohäsivzonenelementen in der Substratgrenzfläche weitere Kohäsivzonenelemente im Volumen einer 100nm Metалldünnschicht hinzugefügt, wodurch sich die Komplexität des Gesamtproblems signifikant erhöhte (Bild 5-35). Auch für diese Modellvariante zeigten sich bezüglich des Grenzflächenrissentwicklungsmusters ähnliche Strukturen wie zuvor beschrieben (Bild 5-35 rechts). Die flächenförmige Ausbreitung des Grenzflächenrisses vollzog sich jedoch langsamer als bei der Modellvariante ohne Kohäsivzonenelemente im Volumen. Der Grund hierfür liegt in der lokalen Spannungsreduktion wegen der simultan ablaufenden Versagensvorgängen innerhalb der Metалldünnschicht, welche direkt an der Kontaktzone zur Indenterspitze verstärkt auftreten (Bild 5-35 links).

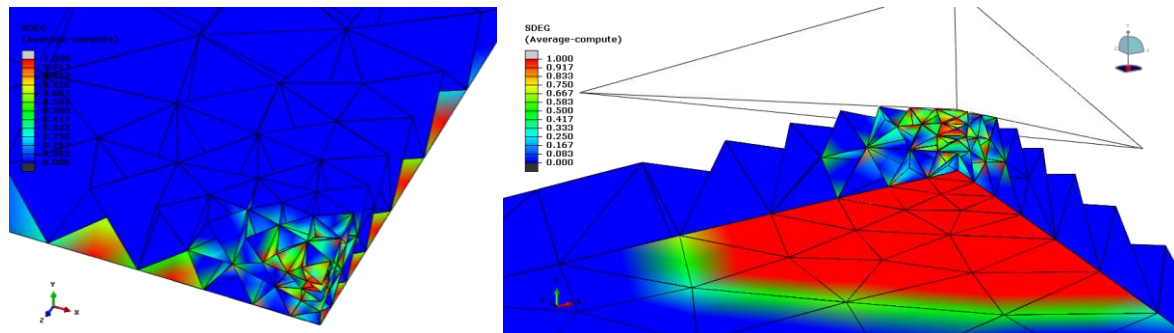


Bild 5-34: Versagen in 100nm Metалldünnschicht in Zone um Indenterspitze und in der Grenzfläche

Der Grund warum anstatt der 400nm Schicht eine nur 100nm dünne Schicht untersucht wurde, liegt in der eingeschränkteren Freiheit der Versetzungsbewegungen der dünneren Metалldünnschicht. Bei ihr lassen sich Phänomene wie ein Pop-In eher erwarten und nachweisen. Experimentell konnte der Pop-In Effekt bisher nur an Einkristallen beobachtet werden, weshalb der bei sehr dünnen Schichten sehr wahrscheinlicher vorliegt als bei dickeren. Amorphe und polykristalline Materialien zeigen das Phänomen eines Pop-Ins nicht. Der Pop-In stellt im Wesentlichen einen Sprung der Indentationstiefe bei nahezu gleichbleibender Belastung in der Kraft-Verschiebungskurve bei den meist lastgesteuerten Versuchen dar. Liegt hingegen eine deformationskontrollierte Indentation vor, so wird ein abrupter Lastabfall bei fast konstanter Indentationstiefe innerhalb der Kraft-Verschiebungskurve während eines Pop-In Ereignisses registriert (Woigard, Dargent, Thomas, & Audurier, 1998). Für die numerische Simulation wurde eine verschiebungsgesteuerte Indentation gewählt, weil die Vorgabe von Kräften am Indenter ein Bogenlängenverfahren nach (Riks, 1972) oder (Crisfield, 1981) zur stabilen numerischen Behandlung erfordert hätten.

Der Pop-In Effekt wird allgemein als Folge einer homogenen Versetzungsnukleation erklärt. Aus ihr leitet sich die Forderung nach einem lokal perfekten Kristallgitter im Wirkungsbereich des bei Indentation aufgebauten Spannungsfeldes ab. Danach sollte eine ideale einkristalline Probe mit ursprünglich versetzungsfreien Bereichen einen Pop-In Effekt aufweisen, wohingegen indentierte Regionen mit lokal vorhandenen Versetzungen keinen Pop-In-Effekt zeigen. Dieses Erklärungsmodell ist allgemein anerkannt und konnte experimentell nachgewiesen werden, indem eine versetzungsfreie Region nach der ersten Indentation in einer unmittelbar benachbarten Region erneut indentiert wurde. Die Experimente zeigten, dass bei der ersten Indentation stets ein Pop-In aufgrund der lokal nicht vorhandenen Versetzungen auftrat. Durch die erste Indentation wurden jedoch lokal große Versetzungsdichten induziert, welche beim nachfolgenden benachbarten Eindrucksexperiment die Ursache für das Nichtvorhandensein des Pop-In Effekts darstellen.

Durch die Nullsetzung der Versetzungsdichten zu Beginn der Simulation konnten bei sehr dünnen Schichten Effekte dargestellt werden, die einem Pop-In Ereignis ähnlich sind (Bild 5-35). Ob dieses Verhalten tatsächlich dem Anfangszustand der Versetzungsdichte zuzuschreiben ist, oder aber aus der Entstehungen bzw. dem schnellen Wachsen von Rissen an der Grenzfläche resultiert, muss weiter untersucht werden.

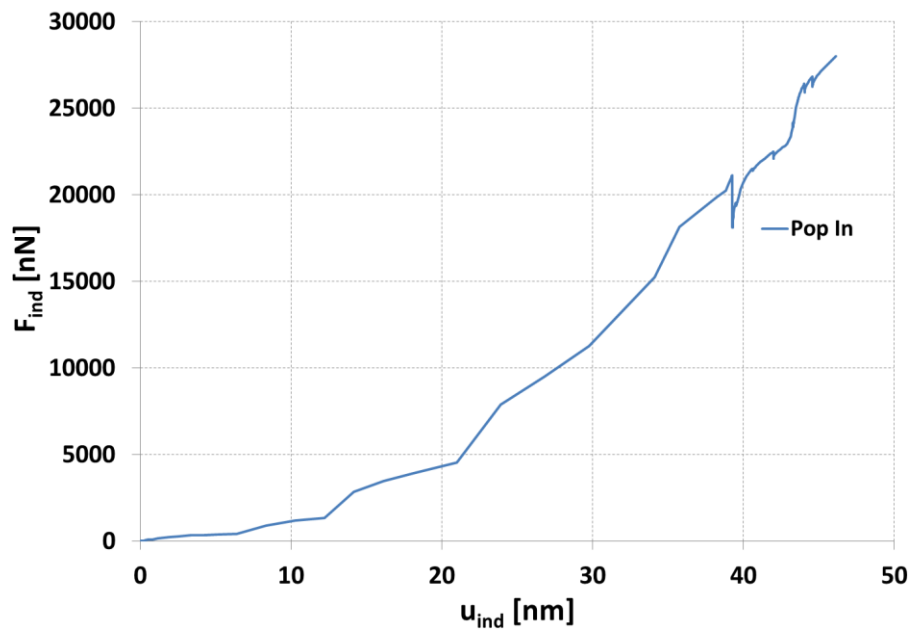


Bild 5-35: Pop-In ähnliches Versagen während Nanoindentation in einer 100nm Cu-Metall dünnschicht

Sollten die in der Simulation auftretenden Diskontinuitäten im Kraft-Verschiebungsverlauf den Grenzflächenrissen zuzuschreiben sein, so könnte das Modell auch dazu verwendet werden um Energiefreisetzungsraten an Grenzflächenrissen zu bestimmen, die messtechnisch kaum determinierbar sind. Hierzu müsste die Indentation für eine gegebene Schicht-Substrat-Kombination bis kurz nach dem Auftreten des Pop-In ähnlichen Phänomens simuliert werden. Mittels Parametervariation der Rissbildungsenergie im Kohäsivzonenmodell könnte dann die simulierte Kraft-Verschiebungskurve an jene des Experiments angepasst und damit die gesuchte Rissenergie ermittelt werden.

In diesem Zusammenhang sei noch darauf hingewiesen, dass man im Konstitutivmodell der kohäsiven Zone prinzipiell die im erweiterten Plastizitätsmodell auftretenden Größen wie Versetzungsdichte, Verzerrungsgradient sowie Spannungstensor 3. Ordnung, berücksichtigen könnte. Grundsätzliche Arbeiten (de Borst, Gutierrez, Wells, Remmers, & Askes, 2004) existieren hierzu bereits, wurden aber noch nicht in Zusammenhang mit der hier beschriebenen Aufgabenstellung sowie dem MSG-Plastizitätsmodell angewendet.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Der hier vorliegenden Arbeit sind zwei Ziele zugrunde gelegt, welche sich einerseits auf das Deformationsverhalten dünner metallischer Strukturen beziehen, andererseits auch das Versagensverhalten innerhalb dieser Schichtstrukturen beschreiben soll. Beide Vorhaben konnten mit den gewählten und vorgestellten Methoden in ausreichender Weise umgesetzt werden. Sie zeigen Möglichkeiten auf, mit nicht all zu komplexen Modellen realistische Simulationen im Rahmen moderater Rechenzeiten durchzuführen. Die vorgestellten Modelle können aufgrund ihrer gut handhabbaren und stabilen Eigenschaften zur praktischen Weiterentwicklung für Komponenten auf dem Gebiet der Mikrosystemtechnik, aber auch zur Verbesserungen von Schichtsystemen auf komplexen Bauteiloberflächen verwendet werden. Durch die flexible und allgemeine Umsetzung sowie Gestaltung der entwickelten Modellierungswerkzeuge ist die Erschließung noch weiterer Anwendungsgebiete in einfacher Weise möglich, die der zunehmenden Miniaturisierung von Systemen und Strukturen in der Zukunft Rechnung tragen.

Bei den durchgeführten numerischen Simulationen zum Deformationsverhalten von nur wenigen hundert Nanometer dünner metallischer Schichten mit Hilfe klassischer kontinuumsmechanischer Plastizitätstheorien konnte die Notwendigkeit der Verwendung eines skalenabhängigen nichtlokalen Materialmodells nachgewiesen werden. Letztere äußern sich speziell bei Eindruckversuchen (Nanoindentation) dünner metallischer Schichten im steiferen Verhalten, was mit klassischen lokalen Plastizitätsmodellen nicht abgebildet werden kann. Beobachtbar ist dieser Skaleneffekt allerdings nur dann, wenn die äußeren geometrischen Bauteilabmessungen der untersuchten Strukturen Größenordnungen aufweisen, die mit denen der räumlichen Ausdehnungen des mikrostrukturellen Aufbaus des Materials vergleichbar sind. Diese Eigenschaft konnte in der Arbeit mit dem verwendeten nichtlokalen „Mechanism Based Strain Gradient“ (MSG) Plastizitätsmodell numerisch sehr gut abgebildet werden. Des Weiteren kann der Skaleneffekt bei dünnen metallischen Schichten erst dann beobachtet werden, wenn die Stärke des metallischen Films so klein ist, dass nur mehr einige wenige Körner in Dickenrichtung vorhanden sind, was ebenfalls in den hier durchgeführten numerischen Simulationen unter Verwendung des nichtlokalen MSG-Modells dargestellt wurde. Daraus resultierend sind auch entsprechend größere Kraftverläufe für dünnere Schichten bei den durchgeführten Nanoindentationsversuchen gemessen worden und im Rahmen der hier vorgeschlagenen Modellbildung auch simulierbar.

Zur Verifikation der in dieser Arbeit verwendeten Modelle und Simulationen wurden experimentelle Untersuchungen an dünnen heterogenen Kupferschichten auf Siliziumsubstraten durchgeführt. Die Herstellung der dazu notwendigen Proben für die durchgeführten Eindruckexperimente erfolgte mittels molekularstrahlepitaktischer Verfahren in Zusammenarbeit mit dem Fachgebiet für dünne Schichten des werkstoffwissenschaftlichen Fachbereichs der TU Darmstadt. Am selben Institut wurden auch die Kupferdünnschichtproben in Hinblick auf die Verteilungen der Größe und Orientierung der vorhandenen Körner mit entsprechenden Verfahren charakterisiert. Für die Versuche sind Proben mit Kupferdünnschichtdicken von 100, 200, 400 und 600nm auf Silizium Substraten mit einer Stärke von ca. 0,5mm hergestellt worden. Mit der Durchführung der Indentationsexperimente wurde das Forschungszentrum Karlsruhe betraut, wo auch Aufnahmen von den Proben mittels Rasterelektronenmikroskopie zur weiteren Charakterisierung entstanden sind.

Auf Basis der experimentellen Ergebnisse konnten bemerkenswerte Übereinstimmungen zu den durchgeführten Simulationen erzielt werden. Die Abweichungen in Bezug auf die Nanoindentationsexperimente sind in diesem Zusammenhang besonders zu erwähnen, da diese unter 20% liegen. Damit sind nicht nur qualitative Aussagen möglich, sondern es können auch quantitative Vorhersagen des mechanischen Verhaltens von Strukturen gemacht werden. Diese Aussage ist durch den Vergleich der Kurven aus Kraft bzw. Eindrucktiefe (F-u) zwischen Experiment und Simulationsmodell gut belegt. Die geringe Abweichung ist umso höher einzustufen, als das hier verwendete nichtlokale MSG-Plastizitätsmodell durch seine moderate Komplexität noch relativ überschaubar und einfach ist, in Relation zu anderen Ansätzen, wie bspw. die rein phänomenologischen erweiterten Theorien mikromorpher oder mikropolarer Kontinua. In diesem Zusammenhang sind auch die Modell- und Materialparameter zu nennen, die bei dem verwendeten MSG Modell im Gegensatz zu anderen Modellen nicht an die durchgeführten Versuche angepasst werden mussten. Die wenigen aber wesentlichen Modellparameter sind in dem MSG-Modell durch die Makrofließkurve des Metalls und den Taylorfaktor, welcher die Schubspannung der Versetzungsbewegung determiniert, gegeben. Beide Parameter können relativ einfach aus Literaturstellen entnommen werden, wobei der in dieser Arbeit verwendete Taylorfaktor mit 1.1 konsistent mit den Angaben in entsprechenden Veröffentlichungen ist und in keinsten Weise an die experimentel-

len Ergebnisse angepasst werden musste. Viele andere nichtlokale Materialmodelle weisen eine wesentlich größere Anzahl von Werkstoffparametern auf, die oft an eigene Experimente anzupassen bzw. kaum in entsprechenden Literaturstellen zu finden sind. Dieser Umstand stellt sicherlich einen großen Vorteil des vorgeschlagenen Modells dar.

Aufgrund der im Rahmen der FEM-Implementierung moderaten Komplexität bezüglich der numerischen Berechnungs- bzw. Auswertungsverfahren des MSG-Plastizitätsmodells, konnten für das Gesamtproblem der Nanoindentation aufwendigere dreidimensionale Simulationsmodelle erstellt werden, welche verschiedene Details wie das Deformationsverhalten und die Geometrie des Prüfkörpers, das Vorhandensein einer Keramikoxid-Zwischenschicht und den Reibungseinfluss berücksichtigen. Deshalb wurden neben dem dominanten Einfluss des Verformungsverhaltens der Kupferdünnsschicht auch Auswirkungen der anderen eben erwähnten Größen auf die Nanoindentation simulativ erfasst und untersucht. In diesem Zusammenhang ist auch das „piling-up“ und „sinking-in“ Phänomen zu erwähnen, das mit dem hier vorgestellten Modell zur Nanoindentation ebenfalls abgebildet werden kann und auch in Bezug auf die gewählten Materialparameterkombinationen konsistent zu den Erklärungsansätzen aus Fachliteratur ist.

Bezüglich der numerischen Umsetzung des MSG-Plastizitätsmodells sind in dieser Arbeit detaillierte Darstellungen zu analytischen Berechnungen angeführt, welche sich im Rahmen der Implementierung innerhalb der FEM mit impliziten Integrationsverfahren ergeben. Da das verwendete Materialmodell Verschiebungsgradienten höherer Ordnung beinhaltet, resultieren bei der expliziten Umsetzung spezielle Problemstellungen, die über die Standardbehandlung üblicher Materialroutinen mit Verschiebungsgradienten 1. Ordnung hinausgehen. Da das beschreibende partielle Differentialgleichungssystem (Impulserhaltung) Terme (Spannungen) höherer Ordnung enthält, musste das Materialverhalten mit Hilfe eines Benutzerelements implementiert werden. Durch die Darstellung mittels des isoparametrischen Konzepts und der damit verbundenen numerischen Integration im transformierten Parameterraum der Ortskoordinaten ergaben sich spezielle Lösungsvorschläge, die detailliert in der Arbeit beschrieben und diskutiert worden sind.

Die in Abschnitt 4.2 („Spezielle Aspekte nichtlokaler Theorien“) angegebene Beschreibung zur numerischen Umsetzung und Implementierung im Rahmen der impliziten FEM wurde ganz bewusst verallgemeinert durchgeführt und kann deshalb direkt für jedes beliebige Element mit entsprechend sinnvoll gewählten Verschiebungsansatzfunktion verwendet werden, weshalb die angegebene Darstellung nicht nur eingeschränkt für das implementierte 10 Knoten Tetraederelement benutzbar ist. Zudem ist im Abschnitt 4 eine allgemeine formalisierte Darstellung zur Vorgehensweise bei der Berücksichtigung von Verschiebungsgradienten und Spannungstermen höherer Ordnung gegeben worden, die ohne großen Aufwand auf andere komplexere gradientenbasierte Materialmodelle angewendet werden kann. Damit ist ein formalisiertes Konzept vorgestellt worden, wie Gradienten und Terme höherer Ordnung von Materialmodellen im Rahmen der Implementierung für FEM Codes ganz allgemein berücksichtigt werden können, was eine zentrale Aufgabenstellung bei der numerischen und softwaretechnischen Umsetzung ist. Begründbar sind diese Aussagen im Wesentlichen dadurch, dass die für die FEM notwendigen Umformungen der schwachen Form bezüglich der Spannungsterme höherer Ordnung durch rekursives mehrmaliges Anwenden des Gaußschen Integralsatzes durchführbar sind und für Spannungsterme 4. oder höherer Ordnung völlig analog zu dem Vorgehen ist, wie dies im Abschnitt 4 („Numerische Implementierung im Rahmen der Finiten Element Methode“) vorgeschlagen und beschrieben wurde.

Für die Darstellung des Integrationsprozesses der schwachen Form im transformierten Parameterraum der räumlichen Koordinaten von Verschiebungsgradienten höherer Ordnung gilt bei der Herleitung formal analoges Vorgehen, wie dies für den Verzerrungsgradienten im Abschnitt 4.3 („Beschreibung und Darstellung der Elementdiskretisierung“) gezeigt wurde. D.h. für die Behandlung von Verschiebungsgradienten 3. oder höherer Ordnung, müsste bei der Herleitung zur Darstellung der Integrationsvorschrift im Parameterraum die Variablentransformation mehrmals ineinander verschachtelt in die entsprechenden unabhängigen Größen eingesetzt und anschließend die mehrfachen Differentiationsprozesse darauf angewendet werden, woraus in weiterer Folge durch die Verwendung von Ketten- und Produktregel der Differentialrechnung die gewünschten und oft sehr komplexen Formulierungen resultieren, was exemplarisch am Verzerrungsgradienten nachvollziehbar einzusehen ist (siehe Abschnitt 4.3 „Beschreibung und Darstellung der Elementdiskretisierung“).

Damit ist in dieser Arbeit eine allgemeine konzeptionelle Vorgehensweise detailliert beschrieben worden, die zur Behandlung von Gradiententheorien höherer Ordnung bei der Implementierung im Rahmen der FEM für implizite Integrationsverfahren und isoparametrische Lagrange-Elementen verwendet

werden kann. Es sei an dieser Stelle noch darauf verwiesen, dass diese Vorgehensweise unabhängig von dem hier verwendeten MSG-Plastizitätsmodell ist, da dieses Konzept nur die reine Elementformulierung, welche die Terme höherer Ordnung beinhalten, betrifft und noch nicht auf das konstitutive Materialverhalten Bezug nimmt. Im Rahmen der softwaretechnischen Umsetzung der Finiten-Elemente-Technologie stellen die erwähnten Inhalte einen interessanten und erwähnenswerten Beitrag dar.

Da das verzerrungsgradientenbasierte MSG-Materialmodell im Kontext der deformationstheoretischen Beschreibung verwendet wurde, sind die Steifigkeitsmatrizen innerhalb der impliziten FEM zwar relativ aufwendig aber dennoch vollständig analytisch ermittelbar und in dieser Arbeit auch explizit bestimmt worden. Hierfür wurde ein Konzept in Verbindung mit dem symbolischen Computer Algebra System „Mathematica“ (Wolfram, 2003) entwickelt, was die fehleranfällige sowie aufwendige analytische Bestimmung dieser Tangenten partiell automatisiert und den entsprechenden Quellcode generiert (Trondl, 2003). Damit entstand als Nebenprodukt ein nützliches Werkzeug, mit dem zukünftige Neuentwicklungen bzw. Variationen von bestehenden komplexen Materialmodellen einfacher, flexibler und fehlerfreier implementierbar sind.

Das numerische Verhalten des hier vorgestellten Gesamtmodells zur Simulation der Nanoindentation erwies sich bei den durchgeführten Berechnungen als bemerkenswert robust und stabil. Dieser Umstand ist einerseits darauf zurückzuführen, dass sämtliche Größen im Rahmen des Newtonschen Iterationsschemas analytisch berechnet und implementiert wurden. Andererseits ist das robuste Verhalten auch durch die intrinsischen Eigenschaften des Materialmodells begründbar, das als einen zentralen Ansatzpunkt die Integration über das RVE (Mesozelle) bezüglich der plastisch dissipierten Energie beinhaltet, welche als Mittelungs- bzw. Filterungsoperation interpretierbar ist, und so einerseits zur Stabilität, andererseits aber auch zur Netzunabhängigkeit der Lösung beiträgt. Bemerkenswert an diesem Umstand ist, dass diese Mittelung nicht künstlich in das Modell eingebaut worden ist, sondern konzeptionell dazu dient, die mikromechanisch motivierten, diskreten Versetzungsmodelle in die kontinuumsmechanische Beschreibungsweise einzubauen.

Für konkrete Untersuchungen im Bereich industriebezogener Anwendungen im F&E Bereich ist das Modell aufgrund seiner erträglichen Rechenzeiten ebenfalls gut geeignet. In diesem Zusammenhang ist nochmals die nur geringe Anzahl von leicht zugänglichen Materialparametern zu erwähnen, die für anwendungsorientierte Bereiche stets ein wichtiges Argument darstellt um praxisrelevante komplexe Bauteile zu entwickeln. In diesem Zusammenhang ist auch die konkrete softwaretechnische Implementierung zu nennen, die durch eine eigenständige Programmeinheit in Form einer DLL (MS-Windows Basis) bzw. „Shared Library“ (LINUX bzw. UNIX Basis) umgesetzt wurde. Dadurch muss nur noch die eigentliche Elementschnittstelle an das verwendete FEM System (ABAQUS, ANSYS, FEAP, ...) angepasst werden, die jedoch für fast alle kommerziellen und akademisch frei verfügbaren Programme sehr ähnlich sind. Durch dieses Konzept sind Portierungen auf unterschiedliche Softwaresysteme und Plattformen mit nur geringem Aufwand verbunden, was für konkrete industriebezogene Anwendungen eine nicht unwesentliche Voraussetzung zur Etablierung neuer Modelle darstellt. Exemplarisch sei an dieser Stelle noch die Rechenzeit eines Problems für die vorgestellte Nanoindentation genannt, welche bei ca. 5 Stunden auf einem Laptop mit 4 Prozessorkernen (Prozessortyp Intel Core i7) und einem System mit insgesamt ca. 60.000 Freiheitsgraden liegt. Dabei ist allerdings noch zu erwähnen, dass die Kontaktiterationen einen nicht unerheblichen Anteil an der Rechenzeit in Anspruch nehmen, weshalb die reine Performance des Benutzerelements des MSG-Plastizitätsmodells für noch größere Probleme ohne weitere Nichtlinearitäten ausreichend sein sollte.

In Bezug auf das Versagensverhalten von Grenzflächenrissen an den untersuchten Metall-Keramik Schichtsystemen sowie auch innerhalb der Metallschicht wurden klassische Kohäsivzonenelemente in Verbindung mit dem implementierten User-Element des versetzungsdichtebasierten Plastizitätsmodells, musste eine spezielle Software entwickelt werden, die es erlaubt eine vorhandene Basisdiskretisierung durch Platzierung flächiger kohäsiver Objekte zu modifizieren und so eine Gesamtstruktur generiert, welche ein Versagensverhalten beschreiben kann. Dieses nützliche Werkzeug stellt ein wichtiges Ergebnis in Bezug auf weitere Versagensmodellierungen von komplexen geometrischen Strukturen dar, da es beliebige Bereiche von generierten Basisdiskretisierungen, die durch Elementmengen frei festzulegen sind und welche die gewünschten Partialvolumen sowie beliebige Grenzflächenregionen (oder eine Kombination beider) beschreiben, mit Kohäsivzonenelementen versehen kann. Damit konnte die Initiierung und Evolution von Rissen sowohl an den Grenzflächen als auch im Material des Metallfilms in Zusammenhang mit dem versetzungsdichtebasierten Plastizitätsmodell si-

multan im Rahmen einer dreidimensionalen Darstellung numerisch simuliert werden. In diesem Zusammenhang konnte das Phänomen eines sogenannten „Pop-in“ Ereignisses im vorgeschlagenen Modell abgebildet werden, dass sich im Kraft-Indentationstiefenverlauf durch Unstetigkeiten widerspiegelt.

Bezüglich möglicher Weiterentwicklungen für das Versagensverhalten innerhalb der Metallschicht ist die xFEM zu nennen. Um die Rissinitiierung und Ausbreitung unabhängig von der vorhandenen Diskretisierung zu modellieren, stellt diese Methode einen interessanten Ansatzpunkt für Weiterentwicklungen dar. Hierzu sind noch keine Arbeiten bekannt, in denen komplexere skalenabhängige versetzungsdichtebasierte Materialmodelle mit der xFEM gekoppelt wurden.

Da davon auszugehen ist, dass die Versetzungsdichten in der Umgebung der Spitze des Risses einen direkten Einfluss auf die Ausbreitung desselben haben, wäre eine Modellmodifikation sinnvoll, welche diesen Umstand mit berücksichtigt. Derzeit hat die Versetzungsdichte nur direkten Einfluss auf die sich einstellenden Spannungen, was durch das MSG-Plastizitätsmodell beschrieben ist. Dabei können die Spannungen die Rissentwicklung durch das Kohäsivzonenmodell direkt beeinflussen, womit die Versetzungsdichte nur indirekt über die Spannungen das Versagensverhalten determiniert. In der Literatur werden jedoch Modelle vorgeschlagen, welche die Rissevolution direkt in Abhängigkeit von der lokal vorhandenen Versetzungsdichte beschreiben. Dieser Ansatz ist eine weitere interessante Möglichkeit das vorhandene Modell zu modifizieren, wobei die Kombination des eben beschriebenen Ansatzes mit der xFEM eine vielversprechende Weiterentwicklung darstellt, zu der gegenwärtig ebenfalls keine veröffentlichten Arbeiten bekannt sind.

Außerdem soll noch auf eine Fragestellung im konstitutiven Modell zur Beschreibung des mechanischen Kontakts zwischen Prüfkörper und Metalldünnschicht verwiesen werden. Bei skalenabhängigen kontinuumsmechanischen Materialmodellen werden häufig Spannungstensoren höherer Ordnung eingeführt, welche aus der verrichteten inneren Leistung resultieren, und denen Verzerrungsgradienten als konjugierte Größe zugeordnet sind. Da konventionelle Reibgesetze nur die üblichen Cauchy-Spannungen berücksichtigen, ist eine interessante Fragestellung diejenige nach der Übertragung von erweiterten Größen, wie den erwähnten Spannungstensoren höherer Ordnung, an den gegebenen Kontaktstellen zwischen Prüfkörper und metallischer Schicht.

Trotz der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse, gibt es eine Reihe von Anknüpfungspunkten um speziell das Versagensverhalten von Mikrostrukturen detaillierter und flexibler zu beschreiben. Da das Deformationsverhalten mit dem hier verwendeten Ansatz gut modellierbar ist, besitzen die vorgeschlagenen Erweiterungen durchaus das Potenzial um das Verständnis des Versagensverhaltens weiter zu verbessern. Des Weiteren können die vorgeschlagenen Ansätze und Modelle wichtige Werkzeuge für zukünftig Innovationen und Weiterentwicklungen auf dem technologisch vielversprechenden Gebiet der Mikrosystemtechnik aber auch der Beschichtung und Miniaturisierung sein.

7 Literaturverzeichnis

Abaqus Analysis User's Manual v6.10-1. (2010). Providence, RI, USA: Dassault Systems Simulia Corp.

Abaqus User Subroutines / Reference Manual v6.10-1. (2010). Providence, RI, USA: Dassault Systems Simulia Corp.

Zencrack Software. (2011). Abgerufen am 2011 von Zentech International Limited:
www.zentech.co.uk/zencrack.html

Aifantis, E. (1984). On the microstructural origin of certain inelastic models. *Journal Engineering Materials Technology*(106), S. 326-330.

Ashby, M. F. (1970). The deformation of plastically non-homogeneous alloys. *Phil. Mag.*, 21, S. 399-424.

Baaser, H., & Gross, D. (2003). Remarks on the use of continuums damage models and on the limitations of their applicability in ductile fracture mechanics. In *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics. Deformation and Failure in Metallic Materials* (Bd. 10, S. 345-362). Springer.

Baaser, H., & Tvergaard, V. (2003). A new algorithmic approach treating nonlocal effects at finite rate-independent deformation using the Rousselier damage model. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(1-2), S. 107-124.

Babuska, I., & Melenk, J. M. (1997). The partition of unity method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40, S. 727-758.

Barenblatt, G. I. (1960). The mathematical theory of equilibrium of cracks in brittle fractures. *Advances in Applied Mechanics*, 7, S. 55-129.

Bazant, Z. P., & Pijaudier-Cabot, G. (1988). Nonlocal Continuum Damage, Localization instability and convergence. *Journal of Applied Mechanics*, 55, S. 287-293.

Bazant, Z. P., Belytschko, T. B., & Chang, T. P. (1984). Continuum theory for strain softening. *Journal of Engineering Mechanics*, 110(12), S. 1666-1692.

Becker, E., & Bürger, E. (1975). *Kontinuumsmechanik*. Stuttgart: Teubner.

Begley, M. R., & Hutchinson, J. W. (1998). The mechanics of size-dependent indentation. *J. Mech. Phys. Solids*, 46 [10], S. 2049–2068 .

Belytschko, T., & Black, T. (1999). Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(5), S. 601-620.

Belytschko, T., Fish, J., & Engelmann, B. E. (1988). A finite element with embedded localized zones. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 70(1), S. 59-89.

Benzeggagh, M. L., & Kenane, M. (1996). Measurement of Mixed-Mode Delamination Fracture Toughness of Unidirectional Glass/Epoxy Composites with Mixed-Mode Bending Apparatus. *Composites Science and Technology*, 56, S. 439–449.

- Bernhardt, E. O. (1941). Über die Mikrohärtigkeit der Feststoffe im Grenzbereich des Kockschen Ähnlichkeitssatzes. *Z. Metallkd.*, 33(135), S. 135-143.
- Besdo, D. (1974). Ein Beitrag zur nichtlinearen Theorie des Cosserat-Kontinuums. *Acta Mech.*, 20, S. 105-131.
- Bouchard, P. O., Bay, F., Chastel, Y., & Toven, I. (2000). Crack propagation modelling using an advanced remeshing technique. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 189, S. 723-742.
- Burgers, J. M. (1939). Some considerations of the field of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice - I. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*(42), S. 293-325.
- Burgers, J. M. (1939). Some considerations of the field of stress connected with dislocations in a regular crystal lattice - II. *Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*(42), S. 378-399.
- Camanho, P. P., & Davila, C. G. (2002). Mixed-Mode Decohesion Finite Elements for the Simulation of Delamination in Composite Materials. *NASA / TM*, S. 1-37.
- Chang, S. Y., Chang, T. K., & Lee, Y. S. (2005). Nanoindenting Mechanical Responses and Interfacial Adhesion Strength of Electrochemically Deposited Copper Film. *J. Electrochem. Soc.*, 152(10), S. 657-663.
- Cosserat, E., & Cosserat, F. (1909). *Théorie des Corps Déformables*. Paris: Herman et Fils.
- Cotrell, A. H. (1949). *Theory of dislocations*. London: Pergamon Press.
- Crisfield, L. A. (1981). A fast incremental/iterative solution procedure that handles snap through. *Computers and Structures*, 13, S. 55-62.
- Dash, W. C. (1956). Copper Precipitation on Dislocations in Silicon. *J. Appl. Phys.*, 27(10), S. 1193-1195.
- de Borst, R. (1991). Simulation of strain localization: A reappraisal of the Cosserat continuum. *Engineering Computations*, 8, S. 317-332.
- de Borst, R., & Mühlhaus, H. B. (1992). Gradient-dependent plasticity: Formulation and algorithmic aspects. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*(35), S. 521-539.
- de Borst, R., Gutierrez, M. A., Wells, G. N., Remmers, J. C., & Askes, H. (2004). Cohesive-zone models, higher-order continuum theories and reliability methods for computational failure analysis. *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, 60, S. 289-315.
- Diepolder, W., Mannl, V., & Lippmann, H. (1991). The Cosserat continuum, a model for grain rotations in metals? *International Journal of Plasticity*, 7, S. 313-328.
- Doghri, I. (2000). *Mechanics of Deformable Solids*. Berlin: Springer.
- Dual, J., Simons, G., Villain, J., Vollmann, J., & Weippert, C. (2004). MECHANICAL PROPERTIES OF MEMS STRUCTURES. *ICEM12- 12th International Conference on Experimental Mechanics*. Bari.
- Dugdale, D. S. (1960). Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 8, S. 100-108.

- Eringen, A. C. (2 1964). Nonlinear theory of simple micro-elastic solids - I. *International Journal of Engineering Sciences*, S. 189-203.
- Eringen, A. C. (1967). *Mechanics of Continua*. New York, London, Sidney: J. Wiley & Sons.
- Eringen, A. C. (1999). *Microcontinuum Field Theories: I. Foundations and Solids*. New York: Springer.
- Eshelby, J. D. (1949). Uniformly moving dislocation. *Proceedings of the Physical Society (Section A)*(62), S. 307-314.
- Eshelby, J. D. (1953). Screw dislocations in thin rods. *J. Appl. Phys.*, 24, S. 176.
- Feenstra, P. H., & de Borst, R. (1995). A plasticity model and algorithm for mode I cracking in concrete. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 38(15), S. 2509-2529.
- Fischer-Cripps, A. C. (2011). *Nanoindentation* (3 Ausg.). New York Dordrecht Heidelberg London: Springer.
- Fleck, N. A., & Hutchinson, J. W. (1993). A phenomenological theory for strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*(41), S. 1825-1857.
- Fleck, N. A., & Hutchinson, J. W. (1997). Strain Gradient Plasticity. *Advances in Applied Mechanics*(33), S. 295-361.
- Fleck, N. A., Muller, G. M., Ashby, M. F., & Hutchinson, J. W. (1994). Strain gradient plasticity: Theory and experiment. *Acta Metallurgica et Materialia*(42), S. 475-487.
- Forest, S., & Sievert, R. (2003). Elastoviscoplastic constitutive frameworks for generalized continua. *Acta Mechanica*, 160, S. 71-111.
- Forest, S., & Sievert, R. (2006). Nonlinear microstrain theories. *Int. J. Solid Struct.*, 43, S. 7224-7245.
- Frank, F. C., & Read, W. T. (1950). Multiplication processes for slow moving dislocations. *Physical Review, II. Series*(79), S. 722-723.
- Gao, H., Huang, Y., & Nix, W. D. (1999). Modeling Plasticity at the Micrometer Scale. *Naturwissenschaften*, 86, S. 507-515.
- Gao, H., Huang, Y., Nix, W. D., & Hutchinson, J. W. (1999). Mechanism-based strain gradient plasticity - I. Theory. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47, S. 1239-1263.
- Gologanu, M., Leblond, J. B., & Devaux, J. (1993). Approximate Models for Ductile Metals containing Nonspherical Voids - Case of Axisymmetric Prolate Ellipsoidal Cavities. *J. Mech. Phys. Solids*, 41, S. 1723-1754.
- Gologanu, M., Leblond, J. B., & Devaux, J. (1994). Approximate Models for Ductile Metals containing Nonspherical Voids - Case of Axisymmetric Oblate Ellipsoidal Cavities. *J. Eng. Mat. Technol.*, 116, S. 290-297.
- Grammenoudis, P., & Tsakmakis, C. (2001). Hardening rules for finite deformations micropolar plasticity: Restrictions imposed by second law of thermodynamics and the postulate of Il'ushin. *Continuum MechanicsTherm.*, 13, S. 325-363.

- Gross, D., & Seelig, T. (2006). *Fracture Mechanics: With an Introduction to Micromechanics*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Gurson, A. L. (1977). Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I - Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media. *J. Eng. Mat. Technol.*, 99, S. 2-15.
- Hall, E. O. (1951). The deformation and aging of mild steel. Part III: discussion. *Proceedings of the Physical Society of London*, 64, S. 747-753.
- Han, C. S., Gao, H., Huang, Y., & Nix, W. D. (2005). Mechanism-based strain gradient crystal plasticity — I. Theory. *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, 53, S. 1188-1203.
- Haque, M. A., & Saif, M. T. (2003). A Review of MEMS-Based Microscale and Nanoscale Tensile and Bending Testing. *Experimental Mechanics*, 43(3), S. 248-255.
- Haque, M. A., & Saif, M. T. (2003). Strain gradient effect in nanoscale thin films. *Acta Materialia*, 51(11), S. 3053-3061.
- Haupt, P. (2000). *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Berlin: Springer.
- Hencky, H. (1924). Zur Theorie plastischer Deformationen und der hierdurch im Material hervorgerufenen Nachspannungen. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*, a, S. 323-334.
- Hillerborg, A., Modeer, M., & Petersson, P. E. (1976). Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement Concrete Research*, 6, S. 773-782.
- Hinkfoth, R. (2003). *Massivumformung, Bulk forming process*. Mainz Aachen: Wissenschaftsverlag.
- Hirth, J. P., & Lothe, J. (1982). *Theory of Dislocations*. New York: Wiley.
- Holzappel, G. A. (2000). *Nonlinear solid mechanics*. Chichester: John Wiley & Sons.
- Huang, Y., Gao, H., Nix, W. D., & Hutchinson, J. W. (1999). Mechanism-based strain gradient plasticity - II. Analysis. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, S. 99-128.
- Huang, Y., Hutchinson, J. W., & Tvergaard, V. (1991). Cavitation instabilities in elastic-plastic solids. *J. Mech. Phys. Solids*, 39, S. 223-241.
- Huber, N., & Schwan, W. (2004). *Ermittlung der mechanischen Eigenschaften von Cu-Schichten auf Si-Substrat*. Bericht (35008679) im Auftrag der TU-Darmstadt, Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft, IMF II, Karlsruhe.
- Huber, N., Nix, W. D., & Gao, H. (2002). Identification of elasticplastic material parameters from pyramidal indentation of thin films. *Proceedings of the Royal society of London, Series A 458* (2023), S. 1593-1620.
- Huber, N., Tsagrakis, I., & Tsakmakis, C. (2000). Determination of Constitutive Properties of Thin Metallic Films on Substrates by Spherical Indentation Using Neural Networks. *International Journal of Solids and Structures*, 37, S. 6499-6516.
- Hull, D., & Bacon, D. J. (1984). *Introduction to dislocations*. Oxford: Pergamon Press.

- Hull, D., & Bacon, D. J. (2001). *Introduction to Dislocations* (4. Ausg.). Oxford: Butterworth - Heinemann.
- Hutter, K., & Jöhnk, K. (2004). *Continuum Methods of Physical Modeling*. Berlin Heidelberg: Springer.
- Hwang, K. C., Jiang, H., Huang, Y., Gao, H., & Hu, N. (2002). A finite deformation theory of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50, S. 81-99.
- Ilyushin, A. A. (1947). Theory of plasticity at simple loading of the bodies exhibiting plastic hardening. *Prikl. Mat. Mekh.*, 11, S. 291-296.
- Ilyushin, A. A. (1963). *Plasticity. Foundations of the General Mathematical Theory*. Moscow: Izd. Akad. Nauk SSSR.
- Kailasam, M., Aravas, N., & Ponte Castaneda, P. (2000). Constitutive models for porous metals with developing anisotropy and applications to deformation processing. *Comp. Mod. in Eng. & Sci.*, 1, S. 105-118.
- Keißig, R., & Benedix, U. (2002). *Höhere technische Mechanik*. Wien: Springer-Verlag.
- Kick, F. (1885). *Das Gesetz der proportionalen Widerstände und seine Anwendungen*. Leipzig: Felix-Verlag.
- Koiter, W. T. (1960). General theorems for elastic-plastic solids. In I. N. Sneddon, & R. Hill, *Progress in Solid Mechanics* (pp. 167-221). Amsterdam, North-Holland.
- Koiter, W. T. (1964). Couple stresses in the theory of elasticity, I and II. *Proc. Ned. Akad. Wet. (B)*, 67 (1), S. 17-44.
- Krawietz, A. (1986). *Materialtheorie*. Berlin - Heidelberg - New York - Tokyo: Springer-Verlag.
- Kröner, E. (1958). *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen* (Bd. 5). (L. Collatz, & F. Lösch, Hrsg.) Berlin - Göttingen - Heidelberg: Springer.
- Kröner, E., & Datta, B. K. (1966). Nichtlokale Elastostatik: Ableitung aus der Gittertheorie. *Zeitschrift für Physik*(196), S. 203 - 211.
- Laursen, T. A. (2002). *Computational Contact and Impact Mechanics*. Springer.
- Lemaitre, J. (1992). *A course of Damage Mechanics*. Springer-Verlag.
- Lemaitre, J., & Chaboche, J. L. (1990). *Mechanics of Solid Materials*. Cambridge University Press.
- Lippmann, H. (1969). Eine Cosserat-Theorie des plastischen Fließens. *Acta Mechanica*(8), S. 255–284.
- Lippmann, H. (1996). *Angewandte Tensorrechnung, Für Ingenieure, Physiker und Mathematiker*. Berlin - Heidelberg: Springer.
- Ma, Q., & Clarke, D. R. (1995). Size dependent hardness in silver single crystals. *J. Materials Research*, 10, S. 853-863.
- Maligno, A. R., Rajaratnam, S., Leen, S. B., & Williams, E. J. (2010). A three dimensional (3D) numerical study of fatigue crack growth using remeshing techniques. *Engineering Fracture Mechanics*, 77(1), S. 94-111.

- Mann, A. B. (2008). Nanomechanical Properties of Solid Surfaces and Thin Films. In B. Bhushan, *Nanotribology and Nanomechanics: An Introduction* (2. Aufl., S. 607-647). Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Mazars, J., & Pijaudier-Cabot, G. (1989). Continuum damage theory - applications to concrete. *ASCE Journal of Engineering Mechanics*, 115(2), S. 345-365.
- Meinhard, H. (1999). *Rheologische Untersuchungen zu Härteeindruckexperimenten im Nanometerbereich*. Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- Melenk, J. M., & Babuska, I. (1996). The partition of unity finite element method: Basic theory and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 139, S. 289-314.
- Meyer, E. (1908). Untersuchungen über Härteprüfungen und Härte. *Z. Ver. Dtsch. Ing.*, 17(52), S. 645-651.
- Mindlin, R. D. (1963). Influence of couple-stresses on stress concentrations. *Experimental Mechanics*, S. 1-7.
- Mindlin, R. D. (1964). Micro-structure in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics*, S. 51-78.
- Mindlin, R. D. (1965). Second gradient of strain and surface tension in linear elasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 1, S. 417-438.
- Mühlhaus, H. B., & Aifantis, E. C. (1991). A variational principle for gradient plasticity. *International Journal of Solids and Structures*(28), S. 845-857.
- Needleman, A., Tveergard, V., & Hutchinson, J. W. (1992). Void growth in plastic solids. In A. S. Argon, *Topics in Fracture and Fatigue* (S. 145-178). New York: Springer-Verlag.
- Neilsen, M. K., & Schreyer, H. L. (1993). Bifurcations in elastic-plastic materials. *International Journal of Solids and Structures*, 30(4), S. 521-544.
- Nix, W. D. (1997). Elastic and plastic properties of thin films on substrates: nano-indentation techniques. *Mat. Sci. and Engr.*, A234-236, S. 37-44.
- Nix, W. D., & Gao, H. (1998). Indentation size effects in crystalline materials: a law for strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 46, S. 411-425.
- Nye, J. F. (1953). Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta metallurgica*, 1, S. 153-162.
- Ogden, R. W. (1984). *Non-Linear Elastic Deformations*. Mineola, New York: Dover Publications, Inc.
- Olivier, J., Carvera, M., Oller, S., & Lubliner, J. (1990). Isotropic damage models and smeared crack analysis of concrete. In N. Bicanic (Hrsg.), *Proc. SCI-C Computer Aided Analysis and Design of Concrete Structures* (S. 945-957). Swansea: Pineridge Press.
- Orowan, E. (1934). Zur Kristallplastizität. *Zeitschrift für Physik*(89), S. 605-659.
- Ortiz, M., Leroy, Y., & Needleman, A. (1987). A finite element method for localized failure analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 61, S. 189-214.

- Ottosen, N. S., & Runesson, K. (1991). Acceleration waves in Elasto-Plasticity. *International Journal of Solids & Structures*, 28, S. 135-159.
- Oyen, M. L. (2010). *Handbook of Nanoindentation - with Biological Applications*. Singapore: Pan Stnford Publishing Pte. Ltd.
- Pamin, J. (1994). *Gradient-dependent plasticity in numerical simulation of localization phenomena*. Delft: Delft University Press.
- Peach, M. O., & Koehler, J. S. (1950). The forces exerted on dislocations and the stress field produced by them. *Physical Review II. Series*(80), S. 436-439.
- Peierls, R. E. (1940). The Size of a dislocation. *Proceedings of the Physical Society of London*(52), S. 34-37.
- Petch, N. J. (1953). The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the Iron and*, 174, S. 25-28.
- Phillips, R. (2001). *Crystals, Defects and Microstructures; Modelling accross scales*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Pietrzak, G., & Curnier, A. (1999). Large deformation frictional contact mechanics: continuum formulation and augmented lagrangean treatment. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 177, S. 351-381.
- Pijaudier-Cabot, G., & Bazant, Z. (1987). Nonlocal damage theory. *ASCE Journal of Engineering Mechanics*, 113(10), S. 1512-1533.
- Polanyi, M. (1934). Über eine Art Gitterstörung, die einen Kristall plastisch machen könnte. *Zeitschrift für Physik*(89).
- Prandtl, L. (1928). Ein Gedankenmodell zur kinetischen Theorie der festen Körper. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik*(8), S. 85-106.
- Qiu, X., Huang, Y., Wei, Y., Gao, H., & Hwang, K. C. (2003). The flow theory of mechanism-based strain gradient plasticity. *Mechanics of Materials*, 35, S. 245-258.
- Ramaswamy, S., & Aravas, N. (1998). Finite element implementation of gradient plasticity models Part I: Gradient-dependent yield functions. *Computer methods in applied mechanics and engineering*(163), S. 11-32.
- Ramaswamy, S., & Aravas, N. (1998). Finite element implementation of gradient plasticity models Part II: Gradient-dependent evolution equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*(163), S. 33-53.
- Reese, S., & Govindjee, S. (1998). A theory of finite viscoelasticity an numerical aspects. *International Journal of Solids & Structures*, 35, S. 3455-3482.
- Rice, J. R. (1972). The localization of plastic deformation. *Theoretical and Applied Mechanics* (S. 207-220). 14th IUTAM Congres.
- Rice, J. R., & Tracey, D. M. (1969). On ductile enlargement of holes in triaxial stress fields. *J. Mech. Phys. Solids*, 17, S. 411-425.

- Riks, E. (1972). The applications of newtons method to the problem of elastic stability. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 39, S. 1060-1066.
- Rossmannith, H. P. (1982). *Finite Elemente in der Bruchmechanik*. Springer-Verlag.
- Sansour, C., & Skatrulla, S. (2007). Generalized continua and dislocation theory. Theoretical concepts, computational methods and experimental verification. *Lecture Notes of the CISM Advanced Course: Generalized Continua*. Udine.
- Sargent, M. P. (1986). Use indentation size effect on microhardness of materials characterisation. In P. J. Blau, & P. R. Lawn, *Microindentation techniques in material science and engineering* (S. 160). Philadelphia: ASTM STP 889 ASTM.
- Schreyer, H. L., & Neilsen, M. K. (1996). Analytical and numerical tests for loss of material stability. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 39, S. 1721-1736.
- Schwarz, H. R. (1980). *Methode der finiten Elemente* (Teubner Studienbücher Mathematik - LAMM 47 Ausg.). Stuttgart: Teubner.
- Schwarz, H. R. (1991). *FORTTRAN-Programme zur Methode der finiten Elemente* (Teubner Studienbücher Mathematik Ausg.). Stuttgart: Vieweg + Teubner Verlag.
- Simo, J. C. (1987). On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspect. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 60, S. 153-173.
- Simo, J. C. (1999). Topics on the Numerical Analysis and Simulation of Plasticity. In P. G. Ciarlet, & J. L. Lions, *Handbook of Numerical Analysis* (Bd. 7). Elsevier Science Publishers.
- Smith, I. M., & Griffiths, D. V. (2005). *Programming the Finite Element Method*. Chichester, UK: John Wiley & Sons.
- Smyshlyaev, V. P., & Fleck, N. A. (1996). The role of strain gradients in the grain size effect for polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 44, S. 465-496.
- Stolken, J. S., & Evans, A. G. (1998). A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Metallurgica*(46), S. 5109-5115.
- Swendson, D., & Ingraffea, A. (1988). Modeling mixed-mode dynamic crack propagation using finite elements: Theory and applications. *Computational Mechanics*, 3, S. 381-397.
- Taylor, G. I. (1943). The mechanism of plastic deformation of crystals. *Proceedings of the Royal Society of London (Series A)*(145), S. 427-436.
- Thouless, M. D. (1994). *Fracture mechanics for thin-film adhesion*. IBM J. RES. DEVELOP.
- Timbrell, C., Chandwani, R., & Maligno, A. (2011). A numerical fracture mechanics tool to help assess the structural integrity of nuclear power plant components. *ISSI - Structural Integrity in Nuclear Engineering*, (S. 27-30). Heifei.
- Toupin, R. A. (1962). Elastic materials with couple-stresses. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*(11), S. 385-414.

- Trondl, A. (2003). *CAS unterstützte Untersuchungen an einem komplexen Materialmodell mit automatischer Generierung von Quellcode zur FEM-Implementierung*. Studienarbeit, Mechanik, Darmstadt.
- Troost, A. (1980). *Einführung in die allgemeine Werkstoffkunde metallischer Werkstoffe I*. Zürich: Bibliographisches Institut.
- Truesdell, C., & Noll, W. (1965). The nonlinear Field theories of mechanics. In S. Flügge, *Handbuch der Physik* (Bd. III). Berlin, Heidelberg, Wien: Springer.
- Truesdell, C., & Toupin, R. (1960). *The Classical Field Theories* (Bd. 1/III). (S. Flügge, Hrsg.) Berlin - Göttingen - Heidelberg: Springer.
- Tvergaard, V. (1990). Material failure by void growth to coalescence. *Adv. Appl. Mech.*, 83, S. 83-147.
- Volterra, V. (1907). *Sur l'équilibre des corps elastiques multiplement connexes* (Bd. 24). Paris: Annales Scientifiques de l'École Normale Supérieure.
- Waters, J. P., & Volinsky, A. A. (2005). Moisture Effects on Copper Thin Film Adhesion. *International Mechanical Engineering Congress and Exposition* (S. 57-61). Orlando, Florida: Conference Proceedings of ASME 2005 Congress.
- Woïrgard, J., Dargenton, J.-C., Thomas, C., & Audurier, V. (1998). A new technology for nanohardness measurements: principle and applications. *Surf. Coatings Tech.*, 101, S. 103-109.
- Wolfram, S. (2003). *The Mathematica Book* (5 Ausg.). Wolfram Media.
- Wriggers, P. (2002). *Computational Contact Mechanics*. John Wiley & Sons.
- Xu, S.-P., & Needleman, A. (1994). Numerical simulation of fast crack growth in brittle solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42, S. 1397-1434.

Bisher sind in dieser Reihe erschienen

Band 1

Zur mikrorissinduzierten Schädigung spröder Materialien

B. Lauterbach, Dissertation 2001, ISBN 3-935868-01-4

Band 2

3D-Simulation der Mikrostrukturentwicklung in Zwei-Phasen-Materialien

R. Müller, Dissertation 2001, ISBN 3-935868-02-2

Band 3

Zur numerischen Simulation von Morphologieänderungen in mikroheterogenen Materialien

S. Kolling, Dissertation 2001, ISBN 3-935868-03-0

Band 4

Theoretische und numerische Untersuchung von Versagensmechanismen in Metall-Keramik-Verbundwerkstoffen

T. Emmel, Dissertation 2002, ISBN 3-935868-04-9

Band 5

On microcrack dominated problems in dynamics and statics of brittle fracture: a numerical study by boundary element techniques

S. Rafiee, Dissertation 2002, ISBN 3-935868-05-7

Band 6

Kontinuumsmechanik anisotroper Festkörper und Fluide

H. Ehrentraut, Habilitationsschrift 2002, ISBN 3-935868-06-5

Band 7

Plane unsteady inviscid incompressible hydrodynamics of a thin elastic profile

N. Blinkova, Dissertation 2002, ISBN 3-935868-07-3

Band 8

Anmerkungen zur Simulation von entfestigendem Materialverhalten

H. Baaser, Habilitationsschrift 2004, ISBN 3-935868-08-1

Band 9

Orts- und zeitadaptive DAE-Methoden zur Beschreibung elastisch-plastischen Materialverhaltens innerhalb der FEM

S. Eckert, Dissertation 2005, ISBN 3-935868-09-X

Band 10

Simulations of the Flow of the Ross Ice Shelf, Antarctica: Parameter Sensitivity Tests and Temperature-Dependent Rate Factor

A. Humbert, Dissertation 2005, ISBN 3-935868-10-3

Band 11

A Thermo-mechanical Continuum Theory with Internal Length of Cohesionless Granular Materials

Chung Fang, Dissertation 2006, ISBN 3-935868-11-1

Band 12

Modeling Dry Granular Avalanches past Different Obstructions: Numerical Simulation and Laboratory Analyses

Chiou Min-Ching, Dissertation 2006, ISBN 3-935868-12-X

Band 13

Configurational forces in defect mechanics and in computational methods

R. Müller, Habilitationsschrift 2005, ISBN 3-935868-13-8

Band 14

Hyperelastic dynamics in physical and material space

S. Kolling, Habilitationsschrift 2007, ISBN 978-3-935868-14-3

Band 15

Phenomenological modeling of ferroelectric material behavior

V. Mehling, Dissertation 2007, ISBN 978-3-935868-15-0

Band 16

Ein mischungsbasiertes Materialmodell zum Knochenumbau

R.-R. Kühn, Dissertation 2006, ISBN 978-3-935868-16-7

Band 17

Einige Erweiterungen der Rand-Finite-Elemente-Methode und deren Anwendung auf Randeffekte in ebenen Laminaten

J. Artel, Dissertation 2007, ISBN 978-3-935868-17-4

Band 18

Spannungskonzentrations-Effekte an Verstärkungspflaster-Ecken

H. Wigger, Dissertation 2008, ISBN 978-3-935868-18-1

Band 19

Rotationseffekte in der Kristallplastizität

C. Bröse, Dissertation 2007, ISBN 978-3-935868-19-8

Band 20

Finite-Element-Modelle zur Simulation von Delaminationen dünner Filme auf Substraten

V. D. Pham, Dissertation 2010, ISBN 978-3-935868-20-4

Band 21

Asymptotische Nahfeldanalysen ebener Multi-Materialverbindungsstellen mit der Methode komplexer Potentiale

C. Sator, Dissertation 2010, ISBN 978-3-935868-21-1

Band 22

Modellierung spröder Rissbildung an Spannungskonzentrationen mit der Bruchmechanik finiter Risse

J. Hebel, Dissertation 2010, ISBN 978-3-935868-22-8

Band 23

Some Contributions to the Homogenization of Macroscopically Isotropic Composites

V. Salit, Dissertation 2011, ISBN 978-3-935868-23-5

Band 24

Asymptotic Analysis of the Load Transfer on Double-Lap Bolted Joints

J. Kratochvil, Dissertation 2012, ISBN 978-3-935868-24-2

Band 25

Spannungssingularitätsordnungen in linear-elastischen und piezoelektrischen Multimaterialkonfigurationen mit der Rand-Finite-Elemente-Methode

W. Mayland, Dissertation 2012, ISBN 978-3-935868-25-9

Band 26

Plastizität und Skaleneffekte sowie Deformations- und Versagensmodellierung dünner metallischer Schichten bei Nanoindentation

A. Trondl, Dissertation 2012, ISBN 978-3-935868-26-6

Der Einsatz von Dünnschichtsystemen hat in den letzten Jahren stark an Bedeutung gewonnen. Anwendungsgebiete sind metallische Schutzschichten z.B. gegen Verschleiß bzw. Korrosion, als Wärmeschutz, für spezielle optische Eigenschaften und viele weitere Bereiche. Die Eignung dünner Schichten beruht darauf, dass sie oft ein Verhalten zeigen, welches von dem massiver Körper aus demselben Material signifikant abweicht. Um ihr mechanisches Verhalten zu beschreiben sind für dünne Schichten meist spezielle Modelle notwendig, da konventionelle Theorien hierzu kaum in der Lage sind. Vielversprechende Ansätze betten dabei mikromechanisch motivierte Modelle in den Rahmen konventioneller kontinuumsmechanischer Beschreibungen ein und erweitern dadurch deren Anwendbarkeit auf Längenskalen bis in den Nanobereich. Ein repräsentativer Vertreter dieser Materialmodelle ist das Mechanism Based Strain Gradient Plastizitätsmodell, welches zur Simulation des Deformationsverhaltens von Kupferdünnschichten in dieser Arbeit verwendet wurde. Die Behandlung und Implementierung von Verschiebungsgradienten 2. Ordnung im Rahmen impliziter Integrationsverfahren der Finiten Elemente Technologie ist einer der Schwerpunkte der Arbeit. Des Weiteren wurde das Versagensverhalten an der Grenz- und in der Dünnschicht mittels eines Kohäsivzonenmodells untersucht. Das vorgestellte Gesamtmodell zur Simulation der Nanoindentation ermöglicht detaillierte Untersuchungen zum mechanischen Verhalten von Dünnschichten, da Eigenschaften wie Skaleneffekte, Pop-In oder Piling-Up gut abgebildet werden können. Die Inhalte dieser Arbeit stellen einen Beitrag zum tieferen Verständnis des Deformationsverhaltens dünner Schichten dar.